

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
INSTITUTO DE FÍSICA “GLEB WATAGHIN”

GÁS DE BOSE DILUÍDO FRACAMENTE CONFINADO

Dissertação de Mestrado apresentada por

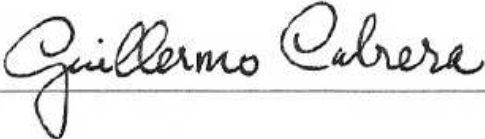
HARLEY ALEJO MARTÍNEZ

Orientador:

Pr. Dr. GUILLERMO G. CABRERA

Este exemplar corresponde à redação final da Dissertação de Mestrado defendida pelo aluno Harley Alejo Martínez e aprovada pela Comissão Julgadora.

Campinas SP, 22 de abril de 2010


_____.

**FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA
BIBLIOTECA DO IFGW - UNICAMP**

AL25g Alejo Martinez, Harley
Gás de Bose diluído fracamente confinado / Harley Alejo
Martinez. -- Campinas, SP : [s.n.], 2010.

Orientador: Guillermo Gerardo Cabrera Oyarzun.
Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual de Campinas,
Instituto de Física "Gleb Wataghin".

1 1. Bose-Einstein, Condensação de. 2. Gases atômicos.
2 3. Potenciais de confinamento. I. Cabrera Oyarzun, Guillermo
3 Gerardo. II. Universidade Estadual de Campinas. Instituto de Física
4 "Gleb Wataghin". III. Título.
5

6 (vsv/ifgw)

Título em inglês: Dilute Bose gas weakly confined

- **Palavras-chave em inglês (Keywords):**

1. Bose-Einstein condensation
2. Atomic gases
3. Confined potentials

- **Área de Concentração:** Física da Matéria Condensada

- **Titulação:** Mestre em Física

- **Banca Examinadora:**

Prof. Guillermo Gerardo Cabrera Oyarzun

Profª Solange Bessa Cavalcanti

Prof. Silvio Antonio Sachetto Vitiello

- **Data da Defesa:** 16-04-2010

- **Programa de Pós-Graduação em:** Física



MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA TESE DE MESTRADO DE **HARLEY ALEJO MARTINEZ - RA 077649** APRESENTADA E APROVADA AO INSTITUTO DE FÍSICA "GLEB WATAGHIN", DA UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS, EM 16 / 04 / 2010.

COMISSÃO JULGADORA:

Prof. Dr. Guillermo Gerardo Cabrera Oyarzún - Presidente da Comissão Julgadora
DFMC/IFGW/UNICAMP

Profa. Dra. Solange Bessa Cavalcanti – IF/UFAL

Prof. Dr. Silvio Antonio Sachetto Vitiello - DFMC/IFGW/UNICAMP

Agradecimentos

Ao professor Guillermo Cabrera, por sua paciência e disponibilidade no campo acadêmico e pela orientação em minha formação profissional e pessoal.

O capítulo 5 deste trabalho tem sido realizado em colaboração dos professores Víctor Pérez García e Vadym Vekšlerchik do "Instituto de Matemática Aplicada" da "Universidad de Castilla-La Mancha", para eles um agradecimento especial por toda a aprendizagem dos últimos seis meses na Espanha.

À Unicamp por ser a "alma mater" que acolheu-me durante este período, ao IFGW, especialmente ao pessoal da APGF. Ao CNPq pelo suporte financeiro, ao igual que o banco Banespa/Santaner, pelo apoio ao programa de mobilidade internacional da Unicamp.

Aos meus amigos, que acompanharam-me na realização deste trabalho, com os quais convivi e compartilhei durante minha permanência no Brasil, sendo de grande suporte anímico para a conclusão do trabalho, em especial agradezco a Carlos, Miguel, Josué e John, para eles umas poucas palavras são insuficientes para manifestar todo o apreço e admiração que sinto. Aos companheiros do grupo de pesquisa Clóvis e Priscila, e ao meu companheiro de sala Wellington, a eles por sua predisposição e importantes contribuições no trabalho. A Isabelle, "por su voz de aliento y por permanecer a mi lado, aún en la distancia."

Aos meus pais, Natividad Martínez e Jorge Alejo, às minhas irmãs e meu irmão, aos meus sobrinhos, a eles "por todo el amor, cariño, comprensión y por apoyarme siempre de una manera incondicional". A toda minha família dedico este trabalho.

Resumo

Esta dissertação tem como objetivo apresentar um estudo crítico dos condensados atômicos de Bose-Einstein (BEC). Tomando como ponto de partida a física do gás livre, estudamos o efeito de potenciais fracamente confinantes. Dois casos foram estudados em detalhe: i) um gás atômico em um poço de potencial quadrado finito com poucos estados ligados; e ii) um sistema confinado em duas dimensões por um potencial oscilador harmônico isotrópico, sendo fracamente confinado na terceira dimensão. Para o primeiro exemplo, estudamos as propriedades termodinâmicas, comparando-as com a transição de fase do gás livre. Interações entre bósons são introduzidas segundo a teoria de Bogoliubov para tratar interações elásticas de dois corpos. Dentro da aproximação de campo médio, as propriedades do condensado são descritas por uma função de onda macroscópica, que satisfaz a equação de Gross-Pitaevskii (GP). Analisamos os efeitos de comprimentos de espalhamento de onda s , atrativos e negativos, para BEC aprisionados no poço de potencial finito, onde o sistema suporta excitações quânticas coerentes não-lineares. Soluções numéricas, para a equação GP independente do tempo, foram encontradas para a função de onda do estado condensado a temperatura zero, bem como para as suas excitações elementares não lineares. Para analisar os resultados, usamos valores realistas de parâmetros para os gases atômicos atualmente estudados experimentalmente. Para o segundo caso mencionado acima, desenvolvemos um programa destinado ao estudo de não-linearidades mais gerais. A física não é restrita só ao BEC, alguns sistemas de interesse são modelados por famílias de equações de Schrödinger não-lineares, sendo a equação GP um caso particular. Para um potencial

harmônico, apesar da não-linearidade, uma vez que uma solução é conhecida, muitas outras soluções podem ser construídas por uma translação espacial do centro do pacote de onda. O método é testado analiticamente no limite da equação de Schrödinger linear com um potencial de oscilador harmônico em duas dimensões. As soluções são obtidas através de uma superposição de soluções estacionárias construídas por deslocamentos espaciais de uma solução exata. O método pode ser estendido para o regime de não-linearidades fracas, e tem uma aplicação direta na geração de estados vórtice em BEC.

Abstract

A critical study of atomic Bose-Einstein condensates (BECs) is presented. Taking as a starting point the physics of the free gas, we study the effect of weakly confining potentials. Two cases were studied in detail: i) an atomic gas in a finite square well potential with a few bound states; and ii) a system confined in two-dimensions by an isotropic harmonic oscillator potential, while being weakly confined in the third dimension. For the first example, we study the thermodynamic properties, comparing with the phase transition of the free gas. Interactions between bosons are introduced following Bogoliubov's approach to treat two-body elastic interactions. Within the mean field approximation, the properties of the condensate are described by a macroscopic wave function, which satisfies the Gross-Pitaevskii equation (GPE). We analyze the effects of both, positive and negative s-wave scattering lengths for BEC trapped in a finite well, where the system supports quantum nonlinear coherent excitations. Numerical solutions for the time-independent GPE have been found for the condensate wave function at zero temperature, as well as for its nonlinear elementary excitations. To analyze the results, we use realistic values of parameters for atomic gases currently been studied experimentally. For the second case mentioned above, we develop a program aimed at the study of more general nonlinearities. The physics is not restricted only to BEC, and the systems of interest are modeled by families of non-linear Schrödinger equations, being the GPE a particular case. For the harmonic potential, in spite of the nonlinearities, once a solution is known, many other solutions can be constructed by spatial translations of the center of the wave packet. The method is probed analytically

in the limit of the linear Schrödinger equation with a harmonic oscillator potential in two dimensions. Solutions are obtained through a superposition of stationary solutions built from spatial displacements of an exact solution. The method can be extended to the regime of weak nonlinearities, and has a direct application in generating vortex states in BEC.

Sumário

1	INTRODUÇÃO	1
2	TEORIA DA CONDENSAÇÃO DE BOSE-EINSTEIN	5
2.1	Gás de Bose não interagente	5
2.1.1	Estatística de Bose-Einstein	6
2.1.2	Temperatura crítica em um gás uniforme	7
2.1.3	Gás confinado em um potencial tipo oscilador harmônico	10
2.2	Efeito do número finito de partículas	12
2.3	Teoria de campo médio de sistemas interagentes	16
3	GÁS DE BOSE CONFINADO EM UM POTENCIAL FINITO	23
3.1	Potencial com um estado ligado	23
3.2	Potencial com dois estados ligados	29

3.3	Comportamento Termodinâmico	32
3.4	Ordem da Transição de Fase	36
3.5	Condensação de Bose-Einstein em duas dimensões	38
4	SOLUÇÕES ESTACIONÁRIAS DA EQUAÇÃO GP	41
4.1	Modos coerentes não lineares da equação GP	41
4.2	Equação GP para um poço de potencial quadrado com simetria esférica	44
4.3	Condições de contorno da função de onda	46
4.4	Solução numérica da equação GP	47
4.5	Resultados numéricos	48
5	SOLUÇÕES VÓRTICE E ANTI-VÓRTICE DA EQUAÇÃO GP	59
5.1	Solução exata da Equação de Schrödinger linear	59
5.1.1	Soluções estacionárias	62
5.1.2	Solução deslocada espacialmente	64
5.2	Superposição de um estado vórtice com a solução gaussiana deslocada .	65
5.3	Superposição de um estado anti-vórtice com a solução gaussiana deslocada	66
5.4	Superposição de uma linha vórtice com uma gaussiana na direção z . .	70
5.5	Equação de Schrödinger não-linear	74

6 CONCLUSÕES	78
A FUNÇÕES INTEGRAIS DE BOSE-EINSTEIN	80
Referências Bibliográficas	82

LISTA DE FIGURAS

2.1	Função distribuição de Bose	7
2.2	Densidade de estados em uma caixa tridimensional	8
2.3	Parâmetro ε como função de $\eta = \hbar\omega/k_B T$	14
2.4	Capacidade calórica C_v como função de $\eta = \hbar\omega/k_B T$	15
3.1	Potencial com um estado ligado	24
3.2	Densidade de estados em um potencial com um único estado ligado	25
3.3	Poço de potencial quadrado com um único estado ligado	27
3.4	Solução gráfica para um potencial quadrado com um ‘gap’ Δ	28
3.5	Temperatura crítica T_c como função do ‘gap’ Δ	29
3.6	Temperatura crítica T_c como função da massa efetiva m_{eff}	30
3.7	Densidade de estados em um potencial com dois estados ligados	30
3.8	Solução gráfica para um potencial quadrado com dois estados ligados	32

3.9	Capacidade calórica como função de temperatura	37
3.10	Calor latente como função do ‘gap’ de energia	39
4.1	Função de onda do estado condensado para diferentes valores do potencial químico .	49
4.2	Função de onda do primeiro modo coerente	50
4.3	Função de onda do segundo modo coerente I	50
4.4	Função de onda do segundo modo coerente II	51
4.5	Função de onda do estado condensado para diferentes comprimentos a	51
4.6	Função de onda do estado condensado com uma variação espacial de a	52
4.7	Potencial químico normalizado como função do número de átomos condensados I .	55
4.8	Potencial químico normalizado como função do número de átomos condensados II .	55
4.9	Potencial químico normalizado como função do número de átomos condensados III .	56
4.10	Razão do número de partículas no estado condensado I	57
4.11	Razão do número de partículas no estado condensado II	57
4.12	Potencial químico normalizado em função do número de partículas para $a > 0$. . .	58
5.1	Gráfico dos zeros da função de onda para estados vórtice e anti-vórtice I	68
5.2	Mapa de contorno da fase da função de onda para estados vórtice I	69
5.3	Gráfico dos zeros da função de onda para estados vórtice e anti-vórtice II	70

5.4	Mapa de contorno da fase da função de onda para estados vórtice e anti-vórtice II .	71
5.5	Gráfico dos zeros da função de onda para estados vórtice e anti-vórtice III	72
5.6	Mapa de contorno da fase da função de onda para estados vórtice e anti-vórtice III	73
5.7	Gráfico dos zeros da função de onda para estados vórtice em 3D	76
5.8	Mapa de contorno do quadrado da norma da função de onda solução da GP	77
5.9	Gráfico dos zeros da função de onda no caso não-linear	77
A.1	Função integral $g_{3/2}(x)$	81

LISTA DE TABELAS

4.1	Soluções numéricas da equação GP para o estado fundamental com $\ell = 0$	53
4.2	Soluções numéricas da equação GP para o primeiro estado excitado com $\ell = 0$	54

Capítulo **1**

INTRODUÇÃO

A condensação de Bose-Einstein (BEC) foi prevista por Einstein em 1924 [1] para um gás ideal de partículas bosônicas¹, segundo o trabalho de Bose consistente em uma derivação alternativa da lei de Planck para a radiação de um corpo negro². Trata-se de um fenômeno muito singular, onde um gás de partículas não interagentes sofre uma transição de fase, causada exclusivamente por correlações de caráter quântico. O fenômeno é caracterizado por uma fração macroscópica das partículas do gás que ocupa o estado fundamental, isto sob certas condições de densidade e temperatura no sistema [2, 3]. A superfluidez do ^4He foi considerada como a primeira manifestação conhecida do BEC e motivou importantes estudos sobre sistemas de bósons interagentes [4, 5], mas a visão corrente é que a superfluidez do hélio está muito longe do quadro de um gás de Bose ideal. Evidências experimentais diretas de BEC foram obtidas a partir de 1995 em vapores atômicos diluídos de gases alcalinos, ^{87}Rb [6], ^{23}Na [7] e ^7Li [8], depois em gases de ^1H [9] e de ^4He metaestável [10], e mais recentemente nos alcalino-terrosos

¹Bósons são definidos como partículas de spin inteiro, porém, inicialmente foram definidos a partir de seu comportamento estatístico.

²Bose introduz originalmente dois conceitos: o primeiro, era considerar as partículas como indistinguíveis (diferença fundamental ao tratamento clássico), e o segundo, que tais partículas poderiam ocupar um mesmo estado quântico, caso contrario aos férmions

^{40}Ca [11] e ^{84}Sr [12], isto a ultra-baixas temperaturas, da ordem de 100 nK, e confinados por armadilhas magnéticas ou óticas.

A transição ocorre quando o comprimento de onda térmico $\Lambda = (2\pi\hbar^2/mk_B T)^{1/2}$ é comparável, ou da mesma ordem de grandeza, da distância média entre as partículas, $r \sim n^{-1/3}$. Aqui m é a massa de uma partícula, k_B é a constante de Boltzmann, T é a temperatura e n é a densidade. O parâmetro que controla a condensação é a “densidade adimensional do espaço de fase” ρ , que se expressa por

$$\rho = n\Lambda^3. \quad (1.1)$$

A teoria de Einstein prediz o valor de $\rho > 2.612\dots$ para ter BEC, porém o valor encontrado na experiência para ^{87}Rb é $\rho_{\text{exp}} = 0.3$ [6], uma ordem de grandeza inferior. A diferença é atribuída em parte à presença do potencial harmônico confinante e a efeitos de interação entre os átomos do gás. Outro problema para identificar a experiência com uma condensação de um gás uniforme, é o baixo número de partículas presente no condensado (tipicamente da ordem de 10000 átomos, até um máximo de 10^7), esperando-se a presença de efeitos de tamanho [13], devido a que o limite termodinâmico ($N \rightarrow \infty$, $V \rightarrow \infty$) nunca é atingido. Uma consequência disso é que estritamente não acontece uma transição de fase neste tipo de sistemas [14].

Em sistemas BEC, os átomos são aprisionados por campos magnéticos ou por campos ópticos. Nessas armadilhas, os átomos são super-resfriados utilizando o processo de resfriamento evaporativo, onde as partículas mais energéticas são removidas do sistema em equilíbrio. Isto tem despertado muito interesse para pesquisar o comportamento e as propriedades de um sistema confinado em diferentes tipos de potenciais: potenciais harmônicos [15] e outros tipos de potenciais, como é o caso de aqueles que crescem como uma lei de potências r^α [17], e potenciais com termos anarmônicos [16]. A importância destes estudos, além do interesse acadêmico, deve-se principalmente a que mudando dinamicamente a forma do potencial, poderíamos modificar de maneira adi-

abática a densidade de átomos, e portanto, a temperatura do condensado ao resfriar o sistema evitando a perda de partículas desde a armadilha [18]. Todos os potenciais mencionados apresentam simetria esférica ou cilíndrica, e têm uma característica comum, que a profundidade e o alcance do potencial são infinitos. Estes tipos de sistemas bosônicos, confinados em um potencial externo, podem ser descritos pela equação de Gross-Pitaevskii [19] (um tipo de equação de Schrödinger não-linear), a qual descreve com sucesso as propriedades de equilíbrio do condensado e a dinâmica da expansão do mesmo, assim como uma grande variedade de estruturas não-lineares observadas experimentalmente em matéria atômica super-resfriada, em particular, solitons escuros [20], solitons claros [21], “gap” solitons [22], solitons vetoriais [23], redes de vórtices [24], vórtices anéis [25], ondas escuras [26], ondas de choque [27], ondas de Faraday [28] e ondas que colapsam [29].

Propomos um estudo crítico de um sistema de bósons diluído, tal que é de esperar que seja dominado pelas interações de dois corpos, em potenciais fracamente confinantes. São considerados dois casos: i) um gás atômico em um poço de potencial finito, com poucos estados ligados; e ii) um sistema confinado em duas dimensões por um potencial harmônico isotrópico, sendo fracamente confinado na terceira dimensão. Para o primeiro caso, o modelo mais simples é um poço de potencial quadrado com um único estado ligado, separado por um “gap” do espectro contínuo (tipo partícula livre com um termo de massa efetiva). Este tipo de potencial tem sido estudado analiticamente em uma dimensão [30] e numericamente no caso tridimensional [31]. O interessante deste potencial é que preserva a idéia original da condensação em um gás livre (mediante a utilização do limite termodinâmico) e, além disso, permite controlar experimentalmente muitos parâmetros. Um resultado importante para o caso de uma barreira de potencial, é a possibilidade de penetração da função de onda do condensado na barreira [32]. Devido a que é possível modificar, em muitas ordens de grandeza, as interações entre as partículas no sistema mediante a utilização de ressonâncias de Feshbach [33], estudaremos particularmente o fenômeno de penetração da função de onda na região classicamente proibida, isto através de mudanças espaciais no parâmetro chamado de comprimento de espalhamento, incluindo mudanças no sinal, o que permite descrever

interações repulsivas ou atrativas. Além de sua conveniência analítica, este modelo pode satisfazer condições experimentais reais, mostrando-se um dos mais simples para a manifestação de fenômenos não-lineares.

Para o segundo caso, vamos encontrar soluções da equação de Schrödinger não-linear com um potencial harmônico isotrópico, usando uma transformação simétrica [34]. Partindo de uma solução conhecida, muitas outras soluções podem ser construídas por uma translação espacial do centro do pacote de onda, produzindo uma família de soluções deslocadas espacialmente. Isto tem uma aplicação direta na dinâmica de condensados de Bose-Einstein, como mecanismo para a geração de vórtices. Em geral, o método é aplicável para não-linearidades que sejam simétricas por translações e que dependam somente da norma da função de onda. Do ponto de vista analítico, o método só pode ser testado no limite da equação de Schrödinger linear com um potencial harmônico, devido à ausência de soluções exatas no regime não-linear. Utilizamos o resultado para encontrar soluções no limite de um gás de partículas não interagentes e confinadas no plano $x - y$, fazendo uma possível extensão ao caso não-linear através de simulações numéricas.

Este trabalho está organizado da seguinte forma: no capítulo 2 fazemos uma breve revisão da teoria BEC, introduzindo as ferramentas que vamos utilizar em nossa pesquisa. No capítulo 3 desenvolvemos o modelo do potencial com poucos estados ligados e separados por um “gap” do espectro contínuo, aqui definimos um limite termodinâmico apropriado em uma aproximação semi-clássica e analisamos as propriedades de equilíbrio da transição de fase. No capítulo 4, apresentamos soluções numéricas da equação de Gross-Pitaevskii (GP) para estados estacionários no condensado e em excitações não-lineares deste, incluindo os gráficos do perfil da função de onda. Algoritmos Runge-Kutta [35] e o método “Shooting” [36] são implementados para resolver numericamente as equações diferenciais envolvidas. Finalmente, no capítulo 5 procuramos soluções analíticas da equação de Schrödinger linear, mediante a translação espacial de uma solução inicial gaussiana.

Capítulo **2**

TEORIA DA CONDENSAÇÃO DE BOSE-EINSTEIN

A condensação de Bose-Einstein (BEC) em gases diluídos tem sido uma das realizações mais importantes em física quântica, e portanto, este fenômeno macroscópico tem recebido uma discussão bastante ampla na literatura. Neste capítulo apresentamos uma perspectiva da teoria BEC desde o modelo original de Einstein, para um gás ideal de bósons, até a formulação atual que inclui uma teoria de campo médio para um sistema de átomos interagentes e confinado em algum tipo de potencial.

2.1 Gás de Bose não interagente

Vamos fazer uma descrição das propriedades de equilíbrio de um gás ideal de bósons. No contexto dos experimentos, com átomos alcalinos, isto significa que estamos considerando vapores atômicos bem diluídos, isto é, que a distância média entre os átomos é muito maior que o alcance da interação. Esta teoria vai ser aplicada em um gás de bósons não interagentes uniforme e será estendida para o caso de um sistema confinado em armadilhas harmônicas.

2.1.1 Estatística de Bose-Einstein

No formalismo estatístico para um gás de bósons escrevemos o potencial grande canônico como

$$\Omega = k_B T \sum_j \ln [1 - e^{\beta(\mu - \epsilon_j)}], \text{ com } \mu < \epsilon_0, \quad (2.1)$$

onde $\beta = 1/k_B T$, com k_B a constante de Boltzmann e ϵ_j são os estados de energia de uma partícula. Consideramos $\epsilon_0 < \epsilon_1 < \dots < \epsilon_j < \dots$ e para cada ϵ_j associamos um \bar{n}_{pj} , correspondente ao valor médio do número de partículas que ocupam este estado. Em (2.1) μ é o potencial químico, o qual é introduzido como um multiplicador de Lagrange associado com o energia média necessária para adicionar uma partícula ao sistema. Por convenção assumimos que a energia do estado fundamental seja igual a zero, $\epsilon_0 = 0$. Deste modo, temos $\mu < 0$, sendo uma consequência da condição de convergência da função partição grande canônica para este sistema.

O valor médio do número de partículas total, de uma configuração dada, é escrito como:

$$\bar{N} = \sum_j \bar{n}_{pj}, \quad (2.2)$$

onde

$$\bar{n}_{pj} = \frac{\partial \Omega}{\partial \epsilon_j} = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_j - \mu)} - 1}, \quad (2.3)$$

sendo esta última a função de distribuição de Bose. Na figura 2.1 é demonstrada a distribuição (2.3) como função da energia, isto para diferentes valores do potencial químico. O valor de $\mu = 0$ corresponde ao caso de temperaturas abaixo da temperatura de transição em BEC.

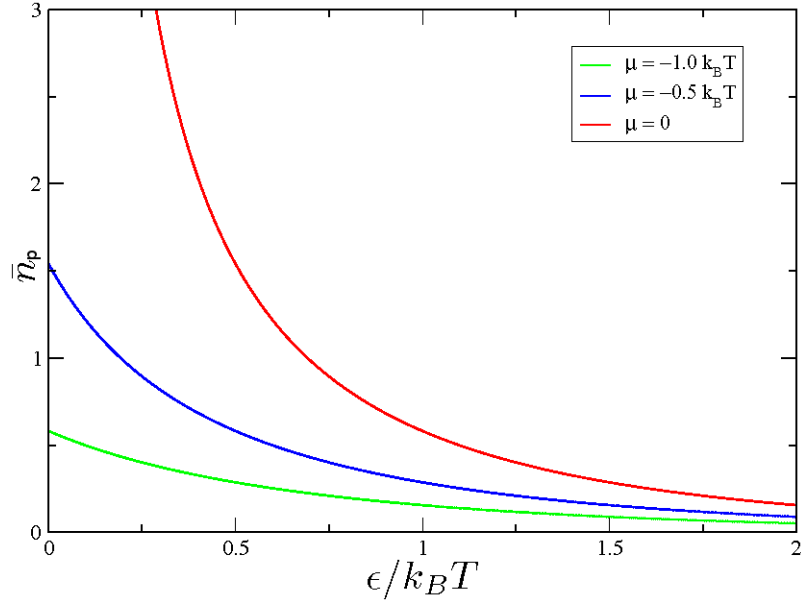


Figura 2.1: Função distribuição de Bose \bar{n}_p como função da energia ϵ (em unidades de $k_B T$) para diferentes valores do potencial químico μ .

2.1.2 Temperatura crítica em um gás uniforme

Das equações (2.2) e (2.3), podemos escrever a expressão para o valor médio do número total de partículas no sistema como:

$$\bar{N} = \sum_j \frac{ze^{-\beta\epsilon_j}}{1 - ze^{-\beta\epsilon_j}}, \quad (2.4)$$

onde $z = e^{\beta\mu}$ é conhecida como a fugacidade, sendo $0 < z \leq 1$. A Eq. (2.4) é separada como

$$\bar{N} = \bar{N}_0 + \bar{N}', \quad (2.5)$$

tal que

$$\bar{N} = \frac{z}{1-z} + \sum_{j>0} \frac{ze^{-\beta\epsilon_j}}{1-ze^{-\beta\epsilon_j}}, \quad (2.6)$$

com $\bar{N}_0 = z/(1-z)$ o número médio de partículas no estado fundamental e \bar{N}' o número médio de partículas nos estados excitados.

Para um gás de bósons ideal em uma caixa tridimensional de volume V e com condições de contorno periódicas, podemos transformar a soma na Eq. (2.6) em uma integral [2, 3] incluindo uma densidade de estados (ver figura 2.2),

$$D(\epsilon) = \frac{2\pi V}{h^3} (2m)^{3/2} \sqrt{\epsilon}, \quad (2.7)$$

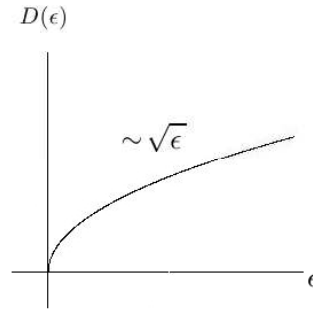


Figura 2.2: Densidade de estados para uma sistema de bósons em uma caixa tridimensional, com condições de contorno periódicas.

assim a Eq. (2.6) fica

$$\bar{N} = \bar{N}_0 + \frac{V}{\Lambda^3} g_{3/2}(z), \quad (2.8)$$

com $\Lambda = h/\sqrt{2\pi mk_B T}$, chamado de comprimento de onda térmico, e $g_{3/2}(z)$ uma das funções integrais de Bose-Einstein, as quais são revisadas no Apêndice A.

Dado que $g_{3/2}(z) \leq g_{3/2}(1)$, existe

$$\bar{N}'_{\max}(T) = V g_{3/2}(1) / \Lambda^3, \quad (2.9)$$

tal que $\bar{N}' \leq \bar{N}'_{\max}$, e portanto, para

$$\bar{N} > \bar{N}'_{\max}, \quad (2.10)$$

a população do estado fundamental é diferente de zero ($\bar{N}_0 \neq 0$). Dado que $\zeta(z) = g_z(1)$ é a função zeta de Riemann, obtemos um critério para a condensação de Bose-Einstein:

$$n\Lambda^3 > \zeta(3/2) \approx 2.612, \quad (2.11)$$

com $n = \bar{N}/V$ a densidade média de partículas.

Definimos uma temperatura crítica T_c^0 , para um volume específico $v = 1/n$, tal que

$$\Lambda_c^3 = v g_{3/2}(1) \quad (2.12)$$

e portanto,

$$T_c^0 = \frac{h^2}{2\pi m k_B} \left(\frac{1}{v \zeta(3/2)} \right)^{2/3} \approx 3.31 \frac{\hbar^2}{m} n^{2/3}, \quad (2.13)$$

sendo definida esta T_c^0 como a mais alta temperatura em que começa a população macroscópica do nível de menor energia. Para temperaturas menores que T_c^0 , o número \bar{N}_0 de átomos no estado fundamental é proporcional ao número total \bar{N} de átomos

$$\bar{N}_0 = \bar{N} \left[1 - \left(\frac{T}{T_c^0} \right)^{3/2} \right] \quad \text{para } T < T_c^0, \quad (2.14)$$

onde os átomos restantes são distribuídos em concordância com a Eq. (2.3), mas com o potencial químico μ igual a zero. Assim

$$\bar{n}_{pj} = \frac{1}{e^{\beta\epsilon_j} - 1}, \quad T < T_c^0. \quad (2.15)$$

Igualmente, dada uma temperatura T definimos um volume crítico v_c :

$$v_c = \frac{\Lambda^3}{\zeta(3/2)}, \quad (2.16)$$

onde o estado condensado aparece para uma combinação apropriada de temperatura e densidade, tal que a região de condensação corresponde à região onde $T < T_c^0$ ou $v < v_c$.

Um análise similar em duas dimensões leva ao resultado

$$n\Lambda_c^3 = \zeta(1), \quad (2.17)$$

portanto, devido a que a função $\zeta(1)$ diverge, para uma temperatura finita não existe BEC nesta configuração.

2.1.3 Gás confinado em um potencial tipo oscilador harmônico

Consideremos um gás de bósons confinado em um potencial harmônico anisotrópico

$$V(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}m(\omega_1^2 x^2 + \omega_2^2 y^2 + \omega_3^2 z^2), \quad (2.18)$$

onde os níveis de energia ϵ_{n_1, n_2, n_3} são

$$\epsilon_{n_1, n_2, n_3} = (n_1 + \frac{1}{2})\hbar\omega_1 + (n_2 + \frac{1}{2})\hbar\omega_2 + (n_3 + \frac{1}{2})\hbar\omega_3. \quad (2.19)$$

Para este caso, temos que a densidade de estados é dada por

$$D(\epsilon) = \frac{\epsilon^2}{2\hbar^3\omega_1\omega_2\omega_3}, \quad (2.20)$$

sendo uma função do quadrado da energia. Em analogia com o gás uniforme, introduzimos a densidade de estados no número de partículas em estados excitados e trocamos a soma pela integral. Assim

$$\bar{N}' = \int_0^\infty d\epsilon D(\epsilon) \bar{n}_p(\epsilon). \quad (2.21)$$

Da mesma maneira, quando o potencial químico alcança o valor da energia do estado fundamental ($\mu = \epsilon_0$), a temperatura de transição T_c é determinada pela condição

$$\bar{N} = \bar{N}'(T_c, \mu = 0), \quad (2.22)$$

aqui redefinimos como zero, em lugar de $\epsilon_0 = 3/2$, a energia do estado fundamental. Assim encontramos que

$$T_c = \frac{\hbar\bar{\omega}}{k} \left[\frac{\bar{N}}{\zeta(3)} \right]^{1/3} \approx 0.94\hbar\bar{\omega}\bar{N}^{1/3}, \quad (2.23)$$

onde

$$\bar{\omega} = (\omega_1\omega_2\omega_3)^{1/3}. \quad (2.24)$$

Finalmente, o número de átomos no estado condensado é dado por

$$\bar{N}_0 = \bar{N} \left[1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^3 \right]. \quad (2.25)$$

2.2 Efeito do número finito de partículas

Na seção anterior discutimos dois casos, primeiro um gás uniforme de bósons não interagente, e segundo, o mesmo gás confinado em um potencial tipo oscilador harmônico. Em ambas situações consideramos o limite termodinâmico no sistema. Isto é, que a razão \bar{N}/V é finita, embora que considera-se que tanto o volume como o número de partículas no sistema é infinito ($V, \bar{N} \rightarrow \infty$), porém, na prática isto está longe de acontecer. Experimentos de BEC mostram um número da ordem de $10^3 - 10^7$ átomos no estado condensado, portanto, como consequência o limite termodinâmico nunca é atingido. O efeito mais importante nessa situação é que não ocorre uma transição de fase rigorosamente, em parte, como mostraremos posteriormente, pela ausência de descontinuidades nas funções termodinâmicas. Não obstante, nestes sistemas é possível identificar uma temperatura crítica associada à transição, devido ao aumento macroscópico do número de partículas no estado fundamental para certas temperaturas. Para observar isto, vamos avaliar \bar{N} diretamente da soma na Eq. (2.4). Para simplificar vamos examinar um gás confinado em um potencial tipo oscilador harmônico isotrópico [37], assim temos que

$$\bar{N} = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{e^{k\beta(\mu-3/2\hbar\omega)}}{(1 - e^{-k\eta})^3}, \quad \text{com } \mu \leq \epsilon_0 = (3/2)\hbar\omega, \quad (2.26)$$

onde é definida a variável adimensional $\eta = \hbar\omega/k_B T$, sendo ω a frequência angular que caracteriza o oscilador harmônico isotrópico de níveis de energia $E_{n_1, n_2, n_3} = \hbar\omega(n_1 +$

$n_2 + n_3 + 3/2$). Normalmente a temperatura crítica é identificada como a temperatura na qual $\mu = \epsilon_0 = (3/2)\hbar\omega$. Redefinimos

$$\mu = \hbar\omega(3/2 - \varepsilon), \quad (2.27)$$

tal que a transição ocorrerá quando $\varepsilon = 0$. Da equação (2.26) calculamos o número de partículas no estado fundamental,

$$\bar{N}_0 = \frac{1}{e^{\varepsilon\eta} - 1}, \quad (2.28)$$

dado que $\bar{N} = \bar{N}_0 + \bar{N}'$, isto é $\bar{N} > \bar{N}_0$, encontramos da equação (2.28) que

$$\bar{N} \geq \frac{1}{e^{\varepsilon\eta} - 1} \implies \varepsilon \geq \frac{1}{\eta} \ln \left[1 + \frac{1}{\bar{N}} \right], \quad (2.29)$$

portanto, a igualdade $\varepsilon = 0$ só é possível no caso que $\bar{N} \rightarrow \infty$. É neste sentido que falamos que rigorosamente não pode dar-se uma transição de fase, tal como acontece no gás uniforme onde tomamos o limite termodinâmico ($\bar{N} \rightarrow \infty, V \rightarrow \infty$). Reescrevendo (2.26) em termos de ε , pela Eq. (2.27) obtemos que

$$\bar{N} = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{e^{k\beta\varepsilon}}{(1 - e^{-k\eta})^3}. \quad (2.30)$$

Esta equação permite, dado um número de partículas, calcular implicitamente ε como função de η . Um gráfico dessa relação é mostrado na figura 2.3. Aqui encontra-se que para η bastante pequeno, mas sem atingir o zero, acontece uma mudança abrupta em ε . Portanto, pela equação (2.28) apresenta-se um rápido incremento no número de partículas no estado fundamental, comportamento similar à condensação de Bose-Einstein.

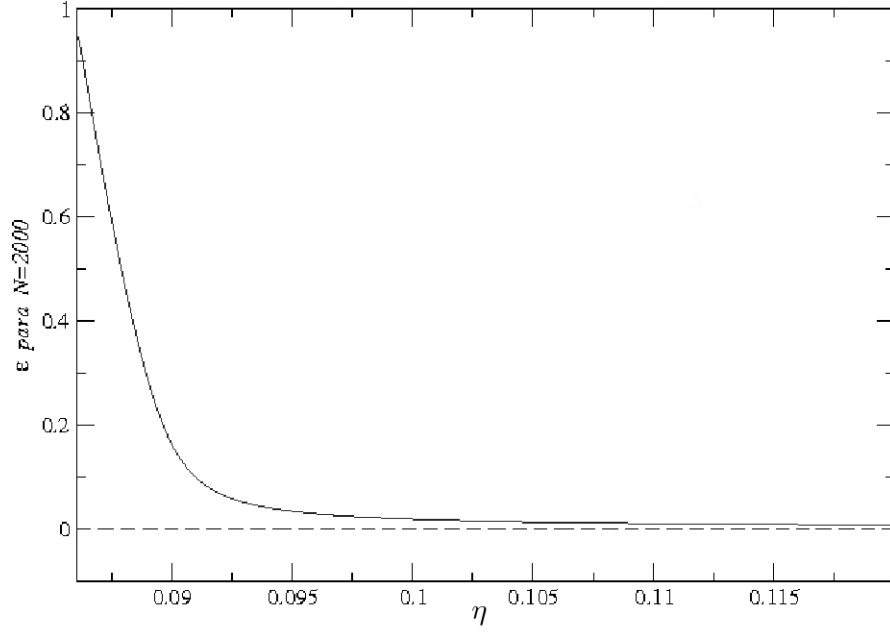


Figura 2.3: ε como função de $\eta = \hbar\omega/k_B T$ para $\bar{N} = 2000$ átomos.

Em ordem de identificar uma temperatura crítica no sistema, fazemos um análise da capacidade calórica, dada pela expressão [37],

$$C_v/k_B = 3\eta^2 \left[4S_3 + S_2 - 3\frac{S_2^2}{S_1} \right], \quad (2.31)$$

com ω e \bar{N} constantes, e

$$S_1 = \sum_{k=1}^{\infty} k \frac{e^{-k\varepsilon\eta}}{(1 - e^{-k\eta})^3}, \quad (2.32)$$

$$S_2 = \sum_{k=1}^{\infty} k \frac{e^{-k\varepsilon\eta - k\eta}}{(1 - e^{-k\eta})^4}, \quad (2.33)$$

$$S_3 = \sum_{k=1}^{\infty} k \frac{e^{-k\epsilon\eta - 2k\eta}}{(1 - e^{-k\eta})^5}. \quad (2.34)$$

Na figura 2.4 mostramos o gráfico da capacidade calórica como função de η . Uma observação importante é que corresponde a uma curva suave, por tal razão, não apresenta descontinuidades em nenhuma de suas derivadas, o que seria um indicador da ocorrência da transição de fase. Um critério “standard” para identificar a temperatura crítica neste caso, é olhar para o ponto onde encontra-se o máximo da capacidade calórica [38].

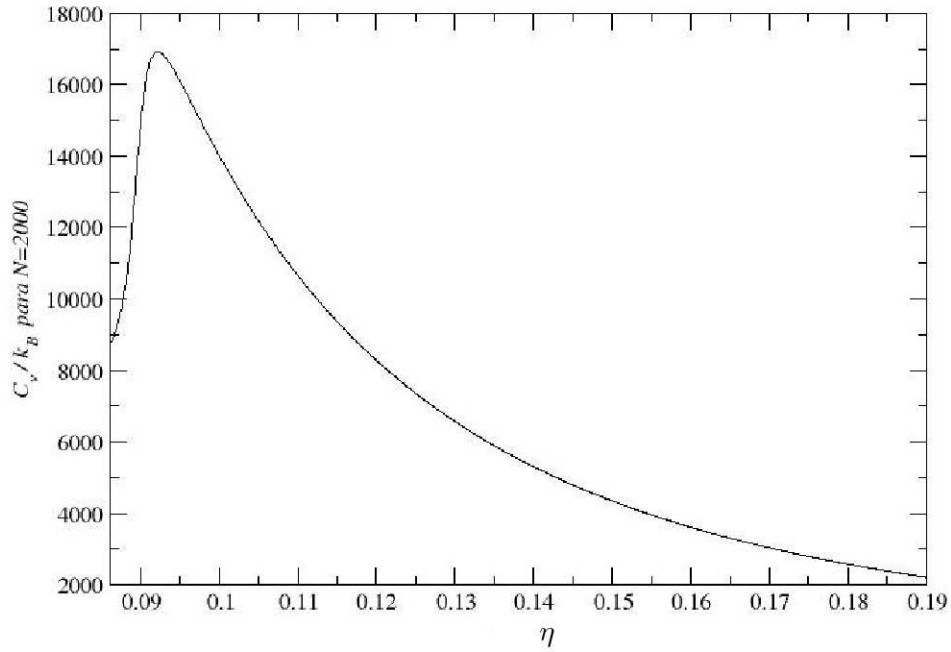


Figura 2.4: C_v como função de $\eta = \hbar\omega/k_B T$ para $N = 2000$ átomos.

Uma correção de tamanho finito para a fração do condensado $\bar{N}_0(T)/\bar{N}$ foi avaliada analiticamente em [39], onde encontram que efeitos de tamanho finito só são significativos para valores de \bar{N} menores a 10^4 . O resultado da correção é

$$\frac{\bar{N}_0}{\bar{N}} = 1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^3 - \frac{3\bar{\omega}\zeta(2)}{2\omega_{\text{ho}}[\zeta(3)]^{2/3}} \left(\frac{T}{T_c}\right)^2 \bar{N}^{-1/3}, \quad (2.35)$$

onde $\omega_{\text{ho}} = (\omega_x \omega_y \omega_z)^{1/3}$ e $\bar{\omega} = (\omega_x + \omega_y + \omega_z)/3$. A Eq. (2.35) mostra que a fração do condensado é reduzida pelos efeitos de tamanho finito.

2.3 Teoria de campo médio de sistemas interagentes

O Hamiltoniano que descreve N bósons interagentes, confinados em um potencial externo $V(\mathbf{r})$, no formalismo de segunda quantização é dado pela expressão

$$\hat{H} = \int d\mathbf{r} \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) H_0 \hat{\Psi}(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}') V_{\text{int}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\Psi}(\mathbf{r}') \hat{\Psi}(\mathbf{r}), \quad (2.36)$$

com

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}), \quad (2.37)$$

o hamiltoniano de uma partícula, m a massa atômica, $\hat{\Psi}(\mathbf{r})$ e $\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r})$ os operadores de campo bosônicos, de destruição e criação de partículas na posição \mathbf{r} respectivamente, e $V_{\text{int}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ é o potencial de interação entre duas partículas. Os operadores de campo bosônicos satisfazem as relações de comutação,

$$[\hat{\Psi}(\mathbf{r}), \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}')] = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (2.38)$$

e,

$$[\hat{\Psi}(\mathbf{r}), \hat{\Psi}(\mathbf{r}')] = [\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}), \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}')] = 0. \quad (2.39)$$

Para determinar a evolução temporal do operador $\hat{\Psi}(\mathbf{r})$ utilizamos a equação de Heisenberg $i\hbar \partial \hat{\Psi} / \partial t = [\hat{\Psi}, \hat{H}]$, sendo H o Hamiltoniano da equação (2.36), junto com as

relações de comutação (2.38) e (2.39), assim

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(\mathbf{r}) + \int d\mathbf{r}' \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) V_{\text{int}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t) \right] \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t). \quad (2.40)$$

Um estudo de um BEC deve-se dar a partir do hamiltoniano (2.36), porém, por tratar-se de muitos corpos interagentes torna-se um problema complicado e impraticável para um número grande N de partículas. Portanto, é aqui onde uma aproximação de campo médio tem sucesso em descrever grande parte das propriedades do sistema. As teorias de campo médio permitem resolver o problema de muitos corpos, substituindo a presença das mutuas interações por um campo externo apropriadamente escolhido, o que permite uma simplificação do problema do ponto de vista analítico e numérico. A idéia original de uma descrição de campo médio, para um gás de bósons uniforme, apareceu com Bogoliubov em 1947 [4]. Uma generalização para o caso não-uniforme é obtida ao separar o operador de campo bosônico em duas componentes [41],

$$\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}, t) + \hat{\Psi}'(\mathbf{r}, t), \quad (2.41)$$

aqui $\psi(\mathbf{r}, t) = \langle \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \rangle$ é uma função complexa definida como o valor esperado do operador de campo, também conhecida como parâmetro de ordem. Este termo está relacionado com a contribuição dos átomos condensados ao operador de campo, e geralmente, é chamado de função de onda macroscópica porque o quadrado de sua norma fixa a densidade do condensado, isto é, $n_0(\mathbf{r}, t) = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2$. O segundo termo em (2.41) é atribuído aos átomos não condensados, e é conhecido como a componente térmica.

Quando $\hat{\Psi}'(\mathbf{r})$ é pequena comparada com $\psi(\mathbf{r}, t)$, pode ser tratada como uma perturbação ao sistema, tal que a separação (2.41) é bastante útil. Em particular, no limite de temperatura zero, a componente térmica é inexistente, e portanto, nessa aproximação consideramos $\hat{\Psi}'(\mathbf{r}, t) \rightarrow 0$, e $\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \rightarrow \psi(\mathbf{r}, t)$. O limite de temperatura zero é entendido como temperaturas muito mais baixas do que a temperatura de transição. Se o

gás de bósons é suficientemente diluído, as interações atômicas são dominadas pelas de baixa energia, assim só as colisões binárias são importantes. As colisões são caracterizadas por um só parâmetro a , chamado de comprimento de espalhamento de onda s , e podem ser representadas por um pseudo-potencial da forma

$$V_{\text{int}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = g\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (2.42)$$

também conhecido como potencial efetivo. Aqui g é um coeficiente de espalhamento dado por

$$g = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m}, \quad (2.43)$$

assim, se $g > 0$ temos interações repulsivas e $g < 0$ corresponde a interações atrativas. Substituindo o pseudo-potencial da Eq. (2.42) na Eq. (2.40) e $\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t)$ por $\psi(\mathbf{r}, t)$ no limite de temperatura zero, obtemos uma função de onda (ou parâmetro de ordem) que satisfaz uma equação de Schrödinger não-linear, sugerida por Gross (1961) e Pitaevskii (1961) [19], essa equação é conhecida como a equação de Gross-Pitaevskii (GP) e é frequentemente usada para estudar as propriedades do condensado de Bose-Einstein. Sua validade é baseada na condição que o número de átomos no condensado seja muito maior do que um, $\bar{N}_0 \gg 1$, e que o comprimento de espalhamento de onda s seja muito menor do que a distância média entre os átomos, isto é $na^3 \ll 1$, sendo n a densidade atômica.

A equação de GP, dependente do tempo, que descreve a função de onda do estado condensado é:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}, t) + g|\psi(\mathbf{r}, t)|^2 \psi(\mathbf{r}, t), \quad (2.44)$$

o termo não-linear $|\psi|^2$ carrega importantes efeitos sobre as propriedades do sistema, sendo uma consequência direta das interações atômicas. A Eq. (2.44) aparece também

em óptica não-linear, onde descreve a propagação de um pulso em um meio com uma não-linearidade do tipo Kerr [40]. Uma derivação alternativa da Eq. (2.44) pode ser obtida por um procedimento variacional, onde minimizamos o funcional de energia:

$$E[\psi] = \int d\mathbf{r} \left[\frac{\hbar}{2m} |\nabla\psi|^2 + V(\mathbf{r})|\psi|^2 + \frac{g}{2} |\psi|^4 \right]. \quad (2.45)$$

Soluções estacionárias da Eq. (2.44), podem ser escritas da forma

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \phi(\mathbf{r}) \exp[-i\mu t/\hbar], \quad (2.46)$$

substituindo (2.46) na Eq. (2.44) obtemos a equação GP independente do tempo:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \phi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r}) + g|\phi(\mathbf{r})|^2 \phi(\mathbf{r}) = \mu\phi(\mathbf{r}), \quad (2.47)$$

que descreve a função de onda do estado condensado $\phi(\mathbf{r})$, com μ o potencial químico, isto é, a energia necessária para adicionar uma partícula ao sistema. A função de onda satisfaz a condição de normalização

$$\int d^3r |\phi(\mathbf{r})|^2 = \bar{N}_0, \quad (2.48)$$

com \bar{N}_0 o número de átomos no estado condensado.

Devido à consideração que $\hat{\Psi}' = 0$ o formalismo descrito anteriormente é válido estritamente só no limite de temperatura zero. As equações GP, dependente e independente do tempo, dão uma excelente descrição das propriedades estáticas e dinâmicas do sistema, tais como (ver por exemplo revisão [41, 42]) perfil de densidade e expansão dinâmica do condensado, efeitos de interferência, excitações coletivas, vórtices e solitons.

A equação GP conduz a uma representação em termos de equações equivalentes de

hidrodinâmica, para a densidade de partículas $|\psi|^2$ e para o gradiente de sua fase. Assim de (2.44) obtemos que

$$\frac{\partial |\psi|^2}{\partial t} + \nabla \cdot \left[\frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) \right] = 0, \quad (2.49)$$

onde (2.49) tem a forma de uma equação de continuidade:

$$\frac{\partial n_0}{\partial t} + \nabla \cdot (n_0 \mathbf{v}) = 0, \quad (2.50)$$

onde $n_0 = |\psi|^2$ é a densidade, e

$$\mathbf{v} = \frac{\hbar}{2mi} \frac{(\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*)}{|\psi|^2} \quad (2.51)$$

é definida como a velocidade do condensado, sendo $\mathbf{j} = n_0 \mathbf{v}$, a densidade de corrente. Essas quantidades podem ser convenientemente representadas empregando a transformação de Madelung [43],

$$\psi(\mathbf{r}, t) = f \exp[iS(\mathbf{r}, t)], \quad (2.52)$$

com f uma amplitude e S uma fase macroscópica. Assim obtemos que

$$n_0 = f^2, \quad (2.53)$$

e a velocidade \mathbf{v} é

$$\mathbf{v} = \frac{\hbar}{m} \nabla S. \quad (2.54)$$

Devido a que \mathbf{v} é o gradiente de uma quantidade escalar, em ausência de singularidades na fase S da função de onda ψ ,

$$\nabla \times \mathbf{v} = \frac{\hbar}{m} \nabla \times \nabla S = 0, \quad (2.55)$$

isto é, o movimento do condensado é irrotacional. A condição de ausência de singularidades na fase S cai em muitos casos, exemplos de isto são os núcleos de estruturas do tipo vórtice. Como consequência de que a função de onda do estado condensado deve ter um valor único, a variação ΔS na fase da função de onda em um contorno fechado devem ser múltiplos de 2π , assim

$$\Delta S = \oint \nabla S \cdot d\mathbf{l} = 2\pi\ell, \quad (2.56)$$

com ℓ um inteiro. De maneira equivalente, a circulação Γ , ao redor do contorno fechado é quantizada em unidades de h/m ,

$$\Gamma = \oint \mathbf{v} \cdot d\mathbf{l} = \ell \frac{h}{m}. \quad (2.57)$$

As estruturas do tipo vórtice são excitações topológicas que têm como característica uma circulação quantizada. Em geral, soluções vórtice bidimensionais são representadas da forma

$$\psi(r, t) = e^{-i\Omega t} e^{i\ell\theta} \sqrt{n_v(r)}, \quad (2.58)$$

onde r e θ são coordenadas polares, Ω a frequência de rotação e ℓ é a carga topológica do vórtice, a qual corresponde a um estado vórtice para ℓ positivo e a um estado anti-vórtice para ℓ negativo, isto é, com um sentido de rotação contrario. Um vórtice é

caracterizado por uma velocidade de rotação infinita na parte central (ou núcleo) o que corresponde a uma singularidade da fase. Assim, a fim de manter uma densidade de energia finita, a densidade do condensado é imposta como zero. Isto vai ser ilustrado com mais clareza no capítulo final deste trabalho, onde utilizaremos a equação GP para descrever a dinâmica de um condensado com estados de vórtice.

Capítulo **3**

GÁS DE BOSE CONFINADO EM UM POTENCIAL FINITO

Consideramos um modelo para um gás de bósons confinado em um poço de potencial finito, em três dimensões e com simetria esférica. Mostramos que neste caso acontece uma transição de fase de primeira ordem e estudamos algumas propriedades termodinâmicas do sistema. O interesse nesse tipo de potencial é devido à possibilidade de solucioná-lo de forma analítica, conservando a idéia do limite termodinâmico. Além disso, tem um alcance e uma profundidade finita, e portanto, possui só um número finito de estados ligados. Para os estados excitados esperamos que a presença do potencial confinante provoque uma diferença no espectro de energia para este sistema quando é comparado com o espectro da partícula livre. Portanto, o efeito do potencial e possíveis efeitos das interações entre as partículas aproxima-se mediante a adição de um termo de massa efetiva.

3.1 Potencial com um estado ligado

O modelo mais simples para o espectro de um potencial finito é supor um único estado ligado separado por um ‘gap’ Δ do espectro contínuo, tipo partícula livre, dependente

do vetor de onda \mathbf{k} (ver figura 3.1). Deste modo, escrevemos os níveis de energia como

$$\epsilon_j = \begin{cases} 0 & \text{para } j = 0, \\ \Delta + \hbar^2 k^2 / 2m_{\text{eff}} & \text{para } j > 0 \end{cases} \quad (3.1)$$

onde o vetor de onda escreve-se como

$$\mathbf{k} = \frac{2\pi}{V^{1/3}}(n_x, n_y, n_z). \quad (3.2)$$

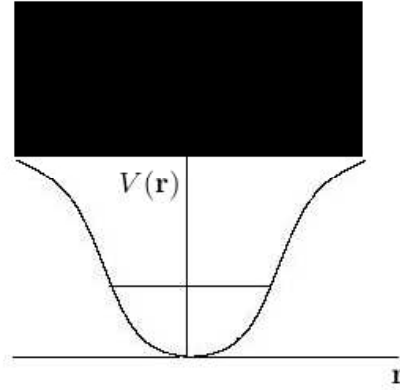


Figura 3.1: Representação de um potencial confinante com um estado ligado

Na Eq. (3.1) é introduzido um termo de massa efetiva m_{eff} , o qual poderia incluir de maneira fenomenológica o efeito do potencial e das interações entre bósons sobre os estados excitados. Similarmente, esperamos que a densidade de estados (ver figura 3.2) seja tipo partícula livre, com a correção do termo da massa efetiva,

$$D(\epsilon) = \delta(0) + \frac{2\pi V}{h^3} (2m_{\text{eff}})^{3/2} \sqrt{\epsilon - \Delta}. \quad (3.3)$$

A equação (2.4) para este sistema pode ser escrita, incluindo a densidade de estados, como

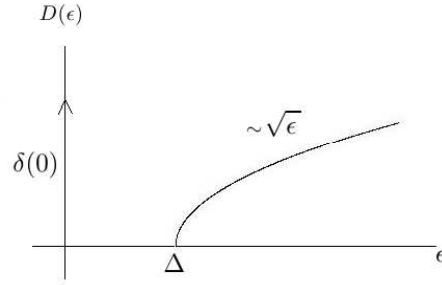


Figura 3.2: Densidade de estados para uma sistema de bósons em um potencial com um único estado ligado

$$\bar{N} = \bar{N}_0 + \frac{2\pi V}{h^3} (2m_{\text{eff}})^{3/2} \int_{\Delta}^{\infty} d\epsilon \sqrt{\epsilon - \Delta} \frac{ze^{-\beta\epsilon}}{1 - ze^{-\beta\epsilon}}, \quad (3.4)$$

com $z = e^{\beta\mu}$ e $\bar{N}_0 = z/(1 - z)$. Em (3.4) fazemos a troca de variável $\xi = \epsilon - \Delta$, tal que

$$\bar{N}' = \frac{2\pi V}{h^3} (2m_{\text{eff}})^{3/2} \int_0^{\infty} d\xi \xi^{1/2} \frac{(ze^{-\beta\Delta})e^{-\beta\xi}}{1 - (ze^{-\beta\Delta})e^{-\beta\xi}}. \quad (3.5)$$

Portanto, chamando $x = ze^{-\beta\Delta}$, obtemos

$$\bar{N}' = \frac{V}{\Lambda^{*3}} g_{3/2}(x), \quad (3.6)$$

com $\Lambda^* = \sqrt{h^2/(2\pi m_{\text{eff}} k_B T)}$.

A equação (3.6) é semelhante ao caso de um gás livre. Dado que $0 \leq z \leq 1$ e $g_{3/2}(x)$ é uma função crescente neste intervalo (ver figura A.1), vamos ter

$$g_{3/2}(x) = g_{3/2}(ze^{-\beta\Delta}) \leq g_{3/2}(e^{-\beta\Delta}), \quad (3.7)$$

onde consideramos o limite crítico (transição de fase) quando o potencial químico atinge

o valor da energia do estado fundamental ϵ_0 , isto é $\mu = 0^1$. Assumimos de (3.7) que existe um $\bar{N}'_{\max}(T)$, tal que para

$$\bar{N} > \bar{N}'_{\max} \Rightarrow \bar{N}_0 \neq 0, \quad (3.8)$$

assim, obtemos o critério da condensação

$$\bar{N} = \frac{V}{\Lambda_c^{*3}} g_{3/2}(e^{-\beta_c \Delta}), \quad (3.9)$$

ou, de maneira equivalente,

$$n\Lambda_c^{*3} = g_{3/2}(e^{-\beta_c \Delta}). \quad (3.10)$$

Para resolver a equação trascendental (3.10) e encontrar a temperatura crítica do sistema, nós podemos fazer o gráfico, de maneira separada, $n\Lambda_c^{*3}$ e $g_{3/2}(e^{-\beta_c \Delta})$ em função da temperatura T . Deste modo, determinamos o ponto de intersecção das duas curvas, onde o valor da temperatura neste ponto corresponderá a T_c .

Para obter soluções numéricas para a equação (3.10), vamos considerar como nosso potencial confinante um poço quadrado finito, com simetria esférica (figura 3.3). O interesse neste tipo de potencial deve-se, principalmente, ao conhecimento analítico que temos do sistema [44]. Para uma partícula livre confinada em um potencial desta forma, sabemos que a existência e o número de estados ligados no sistema, depende dos parâmetros V_0 (profundidade) e r_0 (alcance) do potencial. A condição para que exista, ao menos, um estado ligado é

¹Consideramos $\epsilon_0 = 0$.

$$V_0 r_0^2 > \frac{\hbar^2 \pi^2}{8m}. \quad (3.11)$$

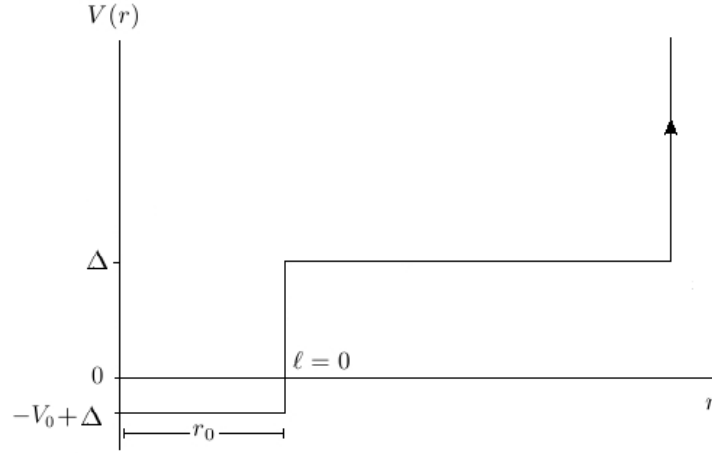


Figura 3.3: Poço de potencial quadrado com um único estado ligado, separado por um 'gap' Δ do espectro contínuo

Assim, fixando r_0 e definindo $\alpha = \hbar^2 \pi^2 / 8mr_0^2$, o número de estados ligados no poço de potencial vai depender da profundidade V_0 . Portanto, encontramos que para $\ell = 0$, apresenta-se um só estado ligado quando $\alpha < V_0 < 9\alpha$; aparecem dois estados ligados quando $9\alpha < V_0 < 25\alpha$; três estados ligados quando $25\alpha < V_0 < 49\alpha$. Além de isso, temos o primeiro estado excitado para $\ell = 1$ quando $V_0 > 4\alpha$.

A seguir ilustramos na figura 3.4, um exemplo da solução gráfica da Eq. (3.10). Examinamos átomos de ^{87}Rb confinados em um poço de potencial com $r_0 = 5.76\mu\text{m}$ e um número de densidade $n = 2.5 \times 10^{12}$ átomos/ cm^3 . Consideramos $m_{\text{eff}} = m = 86.9099$ uma² e garantimos um só estado ligado com $V_0 = 4\alpha = 7.16 \times 10^{-14}$ eV, com um correspondente 'gap' $\Delta = 3.28 \times 10^{-14}$ eV. O ponto de interseção entre os dois gráficos, $n\Lambda^{*3}$ e $g_{3/2}(e^{-\beta\Delta})$, fornece a temperatura crítica na qual ocorre a condensação, neste

²1 uma = 9.3147×10^8 eV/ c^2 .

exemplo, $T_c = 38$ nK, sendo comparada com a temperatura crítica $T_c^0 = 35$ nK no caso de um gás uniforme. Portanto, devido ao confinamento, o primeiro efeito encontrado é o aumento da temperatura da transição de fase. Isso é observado mais claramente na figura 3.5, onde determinamos a temperatura crítica, T_c , como função do “gap”, Δ , a partir da Eq. (3.10) com $m_{\text{eff}} = m$.

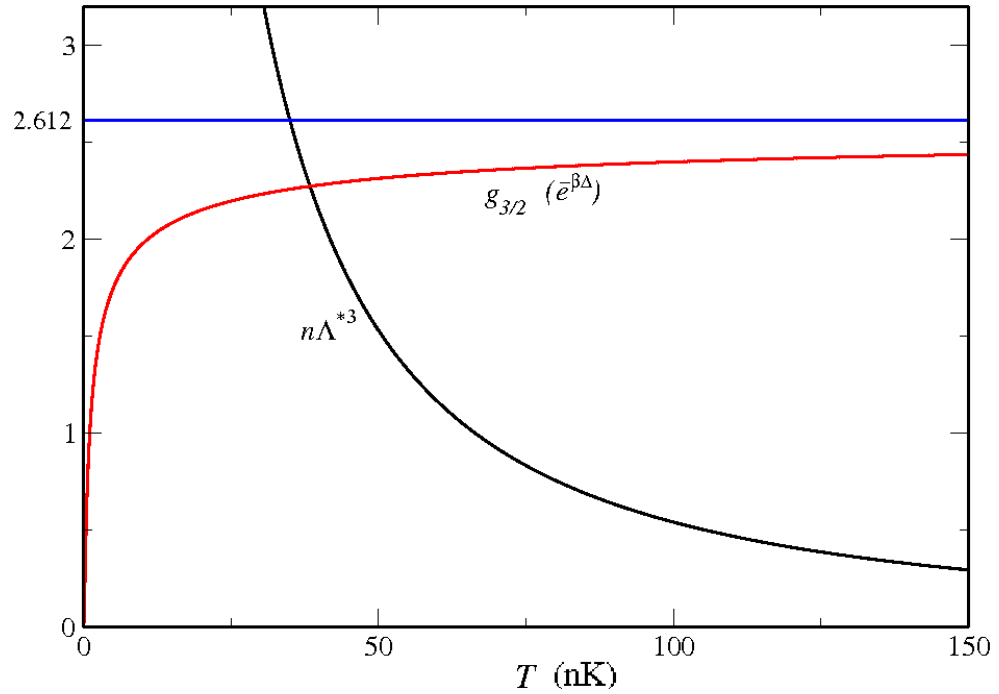


Figura 3.4: Solução gráfica da equação (3.10) para um ‘gap’ $\Delta = 3.28 \times 10^{-14}$ eV. O ponto de interseção das duas curvas, $n\Lambda^3$ e $g_{3/2}(e^{-\beta\Delta})$, dão a temperatura crítica na qual ocorre a condensação. A linha em 2.612 representa a solução com $\Delta = 0$.

O parâmetro de massa efetiva m_{eff} carrega os efeitos do potencial sobre o espectro de partícula livre, assim como também possíveis efeitos produto das interações entre os átomos do gás. Deste modo a figura 3.6 mostra a temperatura crítica T_c como função de m_{eff} . O resultado está em concordância com o mostrado anteriormente, porque uma diminuição de m_{eff} produz uma diminuição na densidade de estados (3.3), e portanto, estaríamos nos distanciando do espectro de partícula livre, o que conduz a um aumento da temperatura T_c .

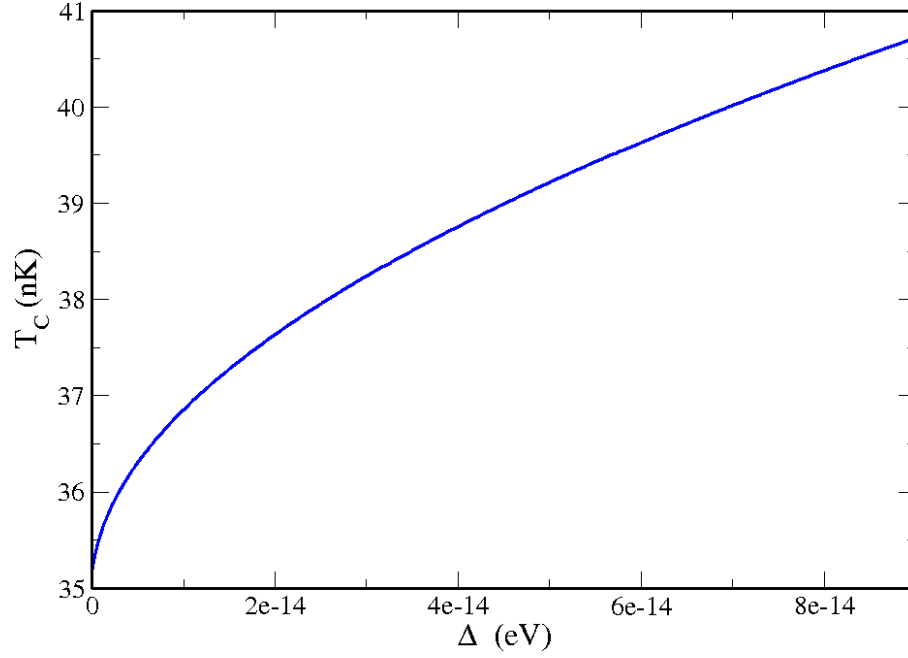


Figura 3.5: Temperatura crítica T_c como função do ‘gap’ Δ , para um estado ligado no poço de potencial.

3.2 Potencial com dois estados ligados

Consideremos agora o caso de dois estados ligados dentro de nosso potencial confinante, tal que a densidade de estados (Fig. 3.7) a escrevemos como

$$D(\epsilon) = \delta(0) + \delta(\Delta') + \frac{2\pi V}{h^3} (2m_{\text{eff}})^{3/2} \sqrt{\epsilon - \Delta}, \quad (3.12)$$

aqui Δ' é o “gap” entre os dois estados ligados e Δ é o “gap” de separação entre o espectro de energia contínuo e o primeiro estado ligado.

O número médio de partículas é,

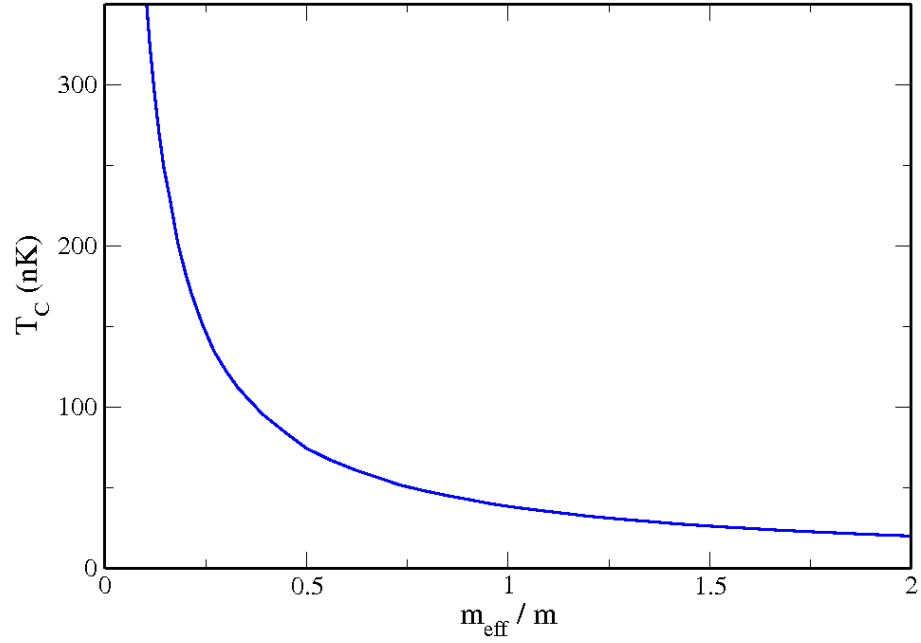


Figura 3.6: Temperatura crítica T_c como função da massa efetiva m_{eff} , para um estado ligado no poço de potencial, para $\Delta = 3.28 \times 10^{-14}$ eV.

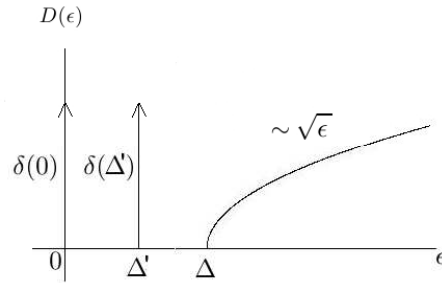


Figura 3.7: Densidade de estados para um sistema de bósons em um potencial com dois estados ligados

$$\bar{N} = \frac{x}{1-x} + \frac{x e^{-\beta \Delta'}}{1 - x e^{-\beta \Delta'}} + \frac{2\pi V}{h^3} (2m_{\text{eff}})^{3/2} \int_{\Delta}^{\infty} d\epsilon \sqrt{\epsilon - \Delta} \frac{x e^{-\beta \epsilon}}{1 - x e^{-\beta \epsilon}} \quad (3.13)$$

$$\bar{N} = \bar{N}_0 + \bar{N}' \quad (3.14)$$

onde separamos a expressão em termos do número de partículas no estado fundamental

\bar{N}_0 e dos estados excitados \bar{N}' . Assim, relacionamos \bar{N}' com

$$\bar{N}' = \frac{xe^{-\beta\Delta'}}{1 - xe^{-\beta\Delta'}} + \frac{V}{\Lambda^3} g_{3/2}(xe^{-\beta\Delta}) \quad (3.15)$$

e novamente, $\bar{N}_0 = x/(1 - x)$. Análogamente, ao caso de um gás livre de bósons, identificamos o caso crítico quando $\mu = 0$, portanto, como a função integral de Bose-Einstein $g_{3/2}(x)$ é monótona crescente, isto é

$$g_{3/2}(xe^{-\beta\Delta}) \leq g_{3/2}(e^{-\beta\Delta}) \quad (3.16)$$

então,

$$\bar{N} \leq \bar{N}'_{\max} = \frac{e^{-\beta\Delta'}}{1 - e^{-\beta\Delta'}} + \frac{V}{\Lambda^3} g_{3/2}(e^{-\beta\Delta}), \quad (3.17)$$

portanto, encontramos uma equação implícita para a temperatura de condensação quando o número médio total de partículas $\bar{N} = \bar{N}'_{\max}$. Assim,

$$\frac{\bar{N}}{V} = \frac{1}{V} \frac{e^{-\beta_c\Delta'}}{1 - e^{-\beta_c\Delta'}} + \frac{1}{\Lambda_c^3} g_{3/2}(e^{-\beta_c\Delta}), \quad (3.18)$$

ou equivalentemente, em termos da densidade de partículas

$$n\Lambda_c^3 = \frac{\Lambda_c^3}{V} \frac{e^{-\beta_c\Delta'}}{1 - e^{-\beta_c\Delta'}} + g_{3/2}(e^{-\beta_c\Delta}). \quad (3.19)$$

A solução gráfica da Eq. (3.19) exibe-se na Fig. 3.8 para $\Delta' = 4.62 \times 10^{-14}$ eV e $\Delta = 9.66 \times 10^{-14}$ eV, correspondente a um $V_0 = 8\alpha = 1.43 \times 10^{-13}$, desta forma encontra-se que $T_c = 40$ nK. Nessa mesma figura compara-se com o caso anterior de

um só estado ligado, onde $T_c = 38$ nK, o que confirma um aumento da temperatura de condensação com o aumento da profundidade do poço de potencial (mais confinante).

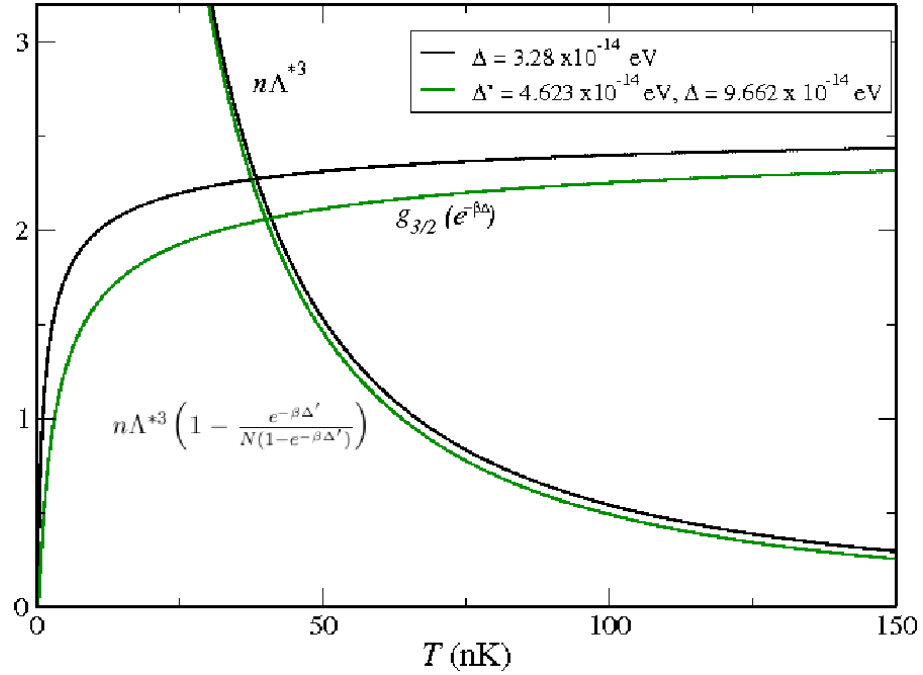


Figura 3.8: Exemplo da solução gráfica da equação (3.19) para um $\Delta' = 4.623 \times 10^{-14}$ eV $\Delta = 9.662 \times 10^{-14}$ eV. O ponto de interseção das duas graficas, $\bar{n}\Lambda^{*3} \left(1 - \frac{e^{-\beta\Delta'}}{N(1-e^{-\beta\Delta'})}\right)$ e $g_{3/2}(e^{-\beta\Delta})$, dão a temperatura crítica na qual ocorre a condensação.

3.3 Comportamento Termodinâmico

Para um gás de Bose ideal temos a relação

$$PV = -k_B T \sum_j \ln(1 - ze^{-\beta\epsilon_j}), \quad (3.20)$$

onde $\beta = 1/k_B T$ e z é a fugacidade, a qual esta relacionada com o potencial químico por $z = e^{\beta\mu}$. Agora, na presença de um potencial confinante com um estado ligado, separado por um “gap” do espectro de energia de partícula livre, podemos transformar a soma em (3.20) em uma integral (introduzindo a densidade de estados) para obter

$$PV = -k_B T \int d\epsilon D(\epsilon) \ln(1 - ze^{-\beta\epsilon}), \quad (3.21)$$

onde consideramos a densidade de estados da Eq. (3.3),

$$D(\epsilon) = \delta(0) + \frac{2\pi V}{h^3} (2m)^{3/2} \sqrt{\epsilon - \Delta}. \quad (3.22)$$

Assim a equação (3.21) a escrevemos como

$$\frac{P}{k_B T} = -\frac{1}{V} \ln(1 - z) - \frac{2\pi}{h^3} (2m)^{3/2} \int_{\Delta}^{\infty} d\epsilon \sqrt{\epsilon - \Delta} \ln(1 - ze^{-\beta\epsilon}). \quad (3.23)$$

Fazendo a troca de variável $\xi = \epsilon - \Delta$,

$$\frac{P}{k_B T} = -\frac{1}{V} \ln(1 - z) - \frac{2\pi}{h^3} (2m)^{3/2} \int_0^{\infty} d\xi \sqrt{\xi} \ln(1 - ze^{-\beta\xi} e^{-\beta\Delta}), \quad (3.24)$$

identificamos o segundo termo na Eq. (3.24) com a função integral de Bose-Einstein $g_{5/2}(x)$ (ver apêndice A), com $x = ze^{-\beta\Delta}$,

$$\frac{P}{k_B T} = \frac{1}{\Lambda^3} g_{5/2}(x) - \frac{1}{V} \ln(1 - z). \quad (3.25)$$

Temos o caso crítico quando $\mu \rightarrow 0$, o equivalentemente $z \rightarrow 1$, dessa maneira segundo o análise de Huang [3], consideramos duas regiões separadas pela superfície bidimensional $n\Lambda^3 = g_{3/2}(e^{-\beta\Delta})$, e dado um $n = \bar{N}/V$ definimos uma temperatura crítica T_c ,

$$\Lambda_c^3 = v g_{3/2}(e^{-\beta_c \Delta}), \quad (3.26)$$

ou dada uma temperatura T , definimos um volume crítico v_c ,

$$v_c = \frac{\Lambda^3}{g_{3/2}(e^{-\beta\Delta})}. \quad (3.27)$$

Finalmente obtemos a expressão,

$$\frac{P}{k_B T} = \begin{cases} \frac{1}{\Lambda^3} g_{5/2}(x), & T > T_c \text{ ou } v > v_c \\ \frac{1}{\Lambda^3} g_{5/2}(e^{-\beta\Delta}), & T < T_c \text{ ou } v < v_c \end{cases} \quad (3.28)$$

onde o termo $V^{-1}\ln(1-z)$ é zero quando $V \rightarrow \infty$ nas duas regiões.

Da relação

$$U = \frac{3}{2}PV, \quad (3.29)$$

obtemos que

$$U = \begin{cases} \frac{3}{2} \frac{k_B TV}{\Lambda^3} g_{5/2}(e^{-\beta\Delta}), & T < T_c \\ \frac{3}{2} \frac{k_B TV}{\Lambda^3} g_{5/2}(x), & T > T_c. \end{cases} \quad (3.30)$$

A capacidade calórica, a volume constante, matematicamente é definida como

$$C_v = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_{N,V}, \quad (3.31)$$

assim, para $T < T_c$ temos que:

$$C_v = \frac{15}{4} \frac{k_B V}{\Lambda^3} g_{5/2}(\varrho) + \frac{3}{2} \frac{k_B V}{\Lambda^3} \frac{\partial \varrho}{\partial T} \frac{\partial}{\partial \varrho} g_{5/2}(\varrho) \quad (3.32)$$

onde $\varrho = e^{-\beta\Delta}$. Agora bem, $\partial \varrho / \partial T = \varrho \Delta / k_B T^2$, e utilizando a relação de recorrência (A.4),

$$\varrho \frac{\partial g_{5/2}(\varrho)}{\partial \varrho} = g_{3/2}(\varrho), \quad (3.33)$$

chegamos na expressão

$$\frac{C_v}{Nk_B} = \frac{15}{4} \frac{1}{n\Lambda^3} g_{5/2}(e^{-\beta\Delta}) + \frac{3}{2} \frac{1}{n\Lambda^3} \frac{\Delta}{Tk_B} g_{3/2}(e^{-\beta\Delta}). \quad (3.34)$$

De maneira equivalente, para $T > T_c$ obtemos

$$C_v = \frac{15}{4} \frac{1}{n\Lambda^3} g_{5/2}(x) - \frac{3}{2} \frac{T}{n\Lambda^3} \frac{\partial x}{\partial T} \frac{\partial}{\partial x} g_{5/2}(x). \quad (3.35)$$

agora bem, da relação de recorrência (A.4)

$$x \frac{\partial}{\partial x} g_{3/2}(x) = g_{1/2}(x), \quad (3.36)$$

e de

$$\left[\frac{\partial}{\partial T} g_{3/2}(x) \right]_v = -\frac{3}{2T} g_{3/2}(x), \quad (3.37)$$

obtemos que

$$\frac{1}{x} \left(\frac{\partial z}{\partial T} \right)_v = -\frac{3}{2T} \frac{g_{3/2}(x)}{g_{1/2}(x)}. \quad (3.38)$$

e portanto,

$$\frac{C_v}{Nk_B} = \frac{15}{4} \frac{g_{5/2}(x)}{g_{3/2}(x)} - \frac{9}{4} \frac{g_{3/2}(x)}{g_{1/2}(x)}. \quad (3.39)$$

Resumindo, obtemos que

$$\frac{C_v}{Nk_B} = \frac{15}{4} \frac{g_{5/2}(e^{-\beta\Delta})}{n\Lambda^3} + \frac{3}{2} \frac{\Delta}{Tk_B} \frac{g_{3/2}(e^{-\beta\Delta})}{n\Lambda^3}, \quad T < T_c \quad (3.40)$$

$$\frac{C_v}{Nk_B} = \frac{15}{4} \frac{g_{5/2}(x)}{g_{3/2}(x)} - \frac{9}{4} \frac{g_{3/2}(x)}{g_{1/2}(x)}, \quad T > T_c. \quad (3.41)$$

Se tomamos os limites pela esquerda ($T \rightarrow T_c^-$) e pela direita ($T \rightarrow T_c^+$) nas Eqs. (3.40) e (3.41) respectivamente, chegamos a

$$\frac{C_v^-}{Nk_B} = \frac{15}{4} \frac{g_{5/2}(e^{-\beta_c\Delta})}{g_{3/2}(e^{-\beta_c\Delta})} + \frac{3}{2} \frac{\Delta}{T_c k_B}, \quad (3.42)$$

e

$$\frac{C_v^+}{Nk_B} = \frac{15}{4} \frac{g_{5/2}(e^{-\beta_c\Delta})}{g_{3/2}(e^{-\beta_c\Delta})} - \frac{9}{4} \frac{g_{3/2}(e^{-\beta_c\Delta})}{g_{1/2}(e^{-\beta_c\Delta})}. \quad (3.43)$$

Isto corresponde a um resultado importante que indica uma descontinuidade na capacidade calórica, algo que não tinha precedentes no caso do gás uniforme, ou no caso de um gás confinado em um potencial tipo oscilador harmônico. A manifestação da descontinuidade na capacidade calórica é uma consequência direta do “gap” Δ da energia proveniente do potencial confinante finito. Na figura 3.9 mostramos um gráfico da capacidade calórica em função da temperatura para diferentes valores de Δ .

3.4 Ordem da Transição de Fase

A região do condensado é definida por $T < T_c$ ou $v < v_c$, sendo P independente de v . Portanto, da equação (3.28), reescrevemos a pressão P na região da condensação como

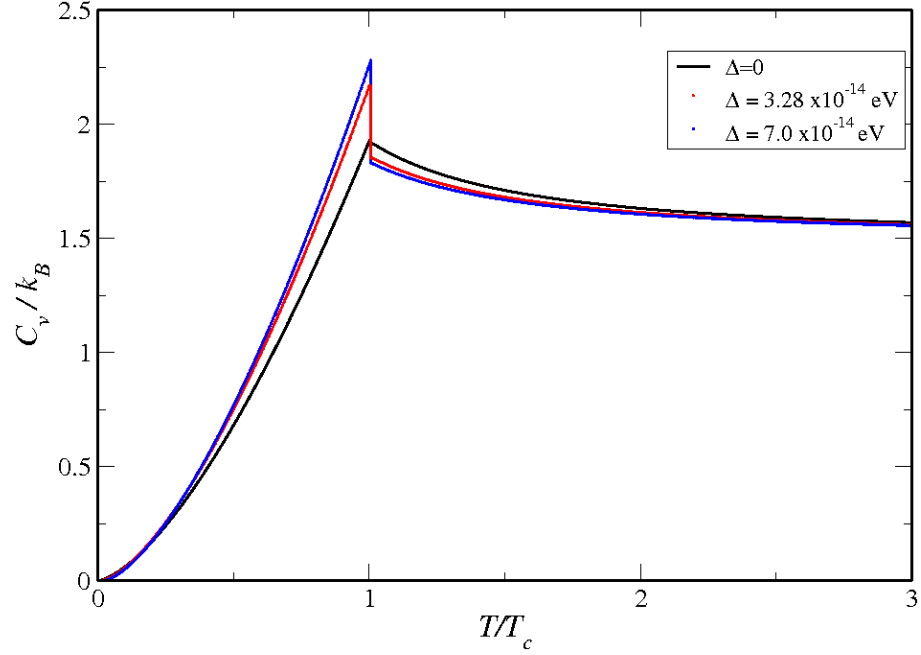


Figura 3.9: Capacidade calórica normalizada $C_v/k_B T$ como uma função da temperatura T , para diferentes valores de Δ .

$$P(T) = \frac{k_B T}{\Lambda^3} g_{5/2}(e^{-\Delta/k_B T}). \quad (3.44)$$

Derivando a expressão anterior com respeito a T obtemos

$$\frac{dP(T)}{dT} = \frac{5}{2} \frac{k_B}{\Lambda^3} g_{5/2}(e^{-\Delta/k_B T}) + \frac{\Delta}{T \Lambda^3} g_{3/2}(e^{-\Delta/k_B T}), \quad (3.45)$$

onde fizemos uso da relação (A.4), tal que

$$x \frac{\partial}{\partial x} g_{5/2}(x) = g_{3/2}(x). \quad (3.46)$$

Podemos reescrever (3.45) como

$$\frac{dP(T)}{dT} = \frac{1}{Tv_c} \left[\frac{5}{2} k_B T \frac{g_{5/2}(e^{-\beta\Delta})}{g_{3/2}(e^{-\beta\Delta})} + \Delta \right]. \quad (3.47)$$

Quando as duas fases coexistem, fase condensada e não condensada, o volume da fase condensada é zero, e o volume da fase térmica é v_c . Portanto, a Eq. (3.47) tem a forma

$$\frac{dP(T)}{dT} = \frac{L}{T(v_2 - v_1)}, \quad (3.48)$$

conhecida como a equação de Clausius-Clapeyron, sendo L o calor latente da transição de fase e $v_2 - v_1 = v_c$. O calor latente então vem dado pela expressão

$$L(T) = \frac{5}{2} k_B T \frac{g_{5/2}(e^{-\beta\Delta})}{g_{3/2}(e^{-\beta\Delta})} + \Delta. \quad (3.49)$$

Na Fig. 3.10 mostramos o calor latente como função de Δ . O resultado da Eq. (3.49) demonstra formalmente que a condensação de Bose-Einstein neste sistema é uma transição de fase de primeira ordem, igual ao gás uniforme ($\Delta = 0$), onde

$$L(T) = \frac{5}{2} k_B T \frac{g_{5/2}(1)}{g_{3/2}(1)}. \quad (3.50)$$

3.5 Condensação de Bose-Einstein em duas dimensões

A continuação vamos considerar um gás de bósons aprisionado em uma caixa bidimensional de área A . Deste modo, escrevemos a densidade de estados como

$$D(\epsilon) = \delta(0) + \frac{2\pi A}{h^2} m_{\text{eff}}, \quad (3.51)$$

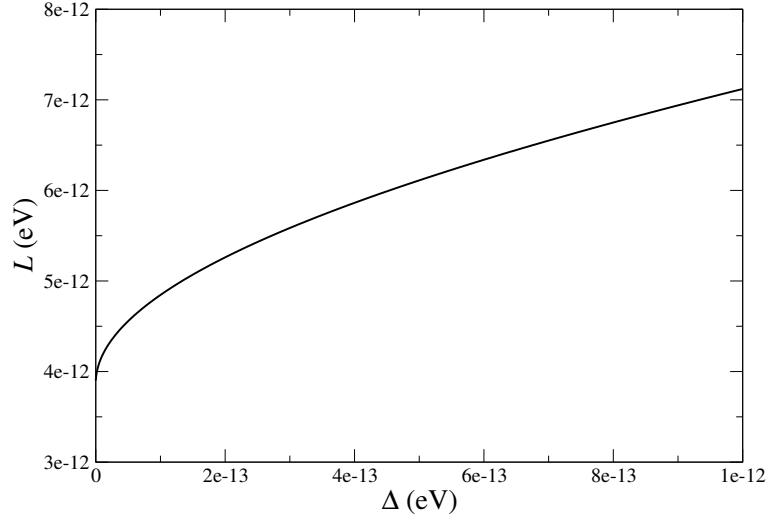


Figura 3.10: Calor latente L como função do “gap” Δ .

com

$$\bar{N} = \frac{z}{1-z} + \frac{2\pi A}{h^2} m_{\text{eff}} \int_{\Delta}^{\infty} d\varepsilon \frac{ze^{-\beta\varepsilon}}{1 - ze^{-\beta\varepsilon}}, \quad (3.52)$$

fazendo a mudança de variável $\xi = \varepsilon - \Delta$ na Eq. (3.52),

$$\bar{N} = \frac{z}{1-z} + \frac{2\pi A}{h^2} m_{\text{eff}} \int_0^{\infty} d\xi \frac{xe^{-\beta\xi}}{1 - xe^{-\beta\xi}}, \quad (3.53)$$

onde $x = ze^{-\beta\Delta}$. Separando $\bar{N} = \bar{N}_0 + \bar{N}'$, identificamos

$$\bar{N}' = \frac{2\pi k_B T A}{h^2} m_{\text{eff}} g_1(x) \quad (3.54)$$

Como $g_1(x)$ é uma função monótona crescente e $z \leq 1$, então

$$g_1(ze^{-\beta\Delta}) \leq g_1(e^{-\beta\Delta}) \quad (3.55)$$

e $\bar{N}' \leq \bar{N}'_{\max}$, com

$$\bar{N}'_{\max} = \frac{2\pi k_B T A}{h^2} m_{\text{eff}} g_1(e^{-\beta\Delta}). \quad (3.56)$$

Assim, começa a população do estado de mais baixa energia quando

$$\bar{N} > \bar{N}'_{\max}, \quad (3.57)$$

sendo o caso crítico ($\bar{N}_0 \neq 0$) atingido quando

$$n\Lambda_c^{*2} = g_1(e^{-\beta_c\Delta}), \quad (3.58)$$

com $\Lambda^* = \sqrt{h^2/2\pi m_{\text{eff}} k_B T}$ e $n = \bar{N}/A$.

Uma solução da Eq. (3.58) é determinada da mesma forma que no caso tridimensional, ficando demonstrada a possibilidade de condensação de Bose-Einstein neste sistema bidimensional. Para $\Delta = 0$ (caso do gás uniforme), como mencionamos, anteriormente, não é possível, para uma temperatura finita, que exista uma condensação de Bose-Einstein.

Capítulo 4

SOLUÇÕES ESTACIONÁRIAS DA EQUAÇÃO GP

No formalismo estatístico da teoria de campo médio, para um sistema de muitos corpos, a equação de Gross-Pitaevskii (GP) descreve as propriedades estáticas e dinâmicas da função de onda do estado condensado de Bose-Einstein. O objetivo neste capítulo é estudar as soluções numéricas da equação GP para um gás de bósons interagentes, dominado pelas interações de duas partículas, e confinado em um poço de potencial finito com simetria esférica. Aplicaremos os algoritmos Runge-Kutta e método “shooting” para resolver a equação diferencial resultante, tendo em conta que o problema envolve condições de contorno sobre a função de onda.

4.1 Modos coerentes não lineares da equação GP

Em baixas temperaturas, $T \rightarrow 0$, a dinâmica de um sistema de bósons interagentes aprisionado em uma armadilha magnética é descrita pela equação GP. Esta equação, devido ao termo de interação, tem uma estrutura idêntica à equação de Schrödinger não-linear, portanto, para um potencial externo $V(\mathbf{r})$, a equação GP admite como solução um conjunto discreto de estados estacionários, com uma distribuição espacial bastante

diferente para cada estado. Esses são conhecidos como modos coerentes não-lineares ou modos topológicos [45, 46]. A solução para o estado fundamental corresponde ao condensado de Bose-Einstein “standard” para um sistema em equilíbrio. Porém, também é possível estudar as soluções para a função de onda do condensado em estados excitados, isto abre uma completa discussão sobre a possibilidade de criar uma condensação em um estado diferente do fundamental[47].

Dentro da aproximação de campo médio a Eq. (2.44), conhecida como equação GP, para o parâmetro de ordem $\psi(\mathbf{r}, t)$ fica da forma:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}, t) + g|\psi(\mathbf{r}, t)|^2 \psi(\mathbf{r}, t), \quad (4.1)$$

com $g = 4\pi\hbar^2 a/m$.

Fazemos uma derivação alternativa da equação GP para uma função de onda coerente. Utilizamos a equação de Heisenberg para a evolução temporal do operador de campo $\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t)$,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) = \hat{H}[\Psi] \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t). \quad (4.2)$$

com

$$\hat{H}[\Psi] = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) + g\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}, t)\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t). \quad (4.3)$$

Um estado coerente $|\nu\rangle$ é definido como sendo um autoestado do operador de campo de destruição, isto é,

$$\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t)|\nu\rangle = \nu(\mathbf{r}, t)|\nu\rangle. \quad (4.4)$$

onde $\nu(\mathbf{r}, t)$ é chamada de função de onda coerente ou campo coerente, e faz o papel de autovalor em (4.3). Tomando a média da equação (4.2) sobre o estado $|\nu\rangle$, obtemos que

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \nu(\mathbf{r}, t) = \hat{H}[\nu] \nu(\mathbf{r}, t), \quad (4.5)$$

com

$$\hat{H}[\nu] = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) + g|\nu(\mathbf{r}, t)|^2 \quad (4.6)$$

e o modo coerente $\nu(\mathbf{r}, t)$ normalizado a N . Neste capítulo, por convenção, fazemos a substituição de N por \bar{N}_0 , para indicar o número médio de partículas no estado condensado.

A equação (4.5) corresponde à mesma equação GP dependente do tempo (4.1), e justifica o nome de modos coerentes não lineares para as soluções da dita equação. Soluções estacionárias para a equação GP dependente do tempo são da forma $\psi(\mathbf{r}, t) = e^{-i\mu t/\hbar} \phi(\mathbf{r})$, com μ o potencial químico.

Reescrevendo a equação (4.1) obtemos,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \phi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}) \phi(\mathbf{r}) + \frac{4\pi\hbar^2 a}{m} |\phi(\mathbf{r})|^2 \phi(\mathbf{r}) = \mu \phi(\mathbf{r}), \quad (4.7)$$

onde

$$\int d^3r |\phi(\mathbf{r})|^2 = N \quad (4.8)$$

A solução da equação (4.7), devido à simetria esférica do potencial, pode ser separada em sua componente radial e sua componente angular, tal que escrevemos a parte radial como

$$\phi(r) = A \frac{\varphi(r)}{r} \quad (4.9)$$

onde A é uma constante de normalização. Introduzindo (4.9) em (4.7) obtemos uma equação de segunda ordem não-linear para a função radial φ , aplicável a um potencial arbitrário $V(r)$ com simetria esférica,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \varphi(r)}{dr^2} + V(r) \varphi(r) + \frac{4\pi \hbar^2 a}{m} A^2 \left[\frac{|\varphi(r)|^2}{r^2} \right] \varphi(r) = \mu \varphi(r). \quad (4.10)$$

4.2 Equação GP para um poço de potencial quadrado com simetria esférica

Consideremos um potencial quadrado finito da forma,

$$V(r) = \begin{cases} 0 & \text{para } r > r_0, \\ -V_0 & \text{para } r < r_0. \end{cases} \quad (4.11)$$

com V_0 a profundidade do poço e r_0 o alcance. Para um poço de potencial finito unidimensional são conhecidas soluções analíticas [30] da equação GP, assim como uma discussão para o problema do poço finito 3D com simetria esférica, na mesma equação, é apresentada em [31], onde soluções numéricas e variacionais tem sido apresentadas. Procuramos soluções numéricas da equação (4.10) para o primeiro e segundo modo coerente não-linear, fazendo um análise em termos do número de estados ligados no poço, os quais tem uma dependência direta dos parâmetros V_0 e r_0 do potencial.

Na equação (4.10), fazemos a troca de variável:

$$x = \left[\frac{2mV_0}{\hbar^2} \right]^{1/2} r, \quad (4.12)$$

tal que, reescrevemos a equação GP radial como uma equação adimensional, isto para facilitar o calculo numérico. Desta maneira, temos que para $x < x_0$

$$\frac{d^2 \varphi_j(x)}{dx^2} + \left[\beta_j + 1 - \gamma A^2 \left(\frac{|\varphi_j(x)|^2}{x^2} \right) \right] \varphi_j(x) = 0, \quad (4.13)$$

com

$$\beta_j = \frac{\mu_j}{V_0}, \quad (4.14)$$

$$\gamma = 8\pi a \quad (4.15)$$

e

$$x_0 = \left[\frac{2mV_0}{\hbar^2} \right]^{1/2} r_0, \quad (4.16)$$

neste capítulo redefinimos β (que antes estava relacionada com a constante de Boltzmann) como um potencial químico normalizado e escrevemos o sub-índice j para ressaltar que existe uma família de soluções para (4.13), caracterizada pela dependência da norma $C_{N_j} = \int dx |\varphi_j(x)|^2$ com o parâmetro β_j . Lembramos que para o caso de interações repulsivas temos $a > 0$, e para interações atrativas $a < 0$.

Para $x > x_0$ temos que a equação adimensional fica

$$\frac{d^2 \varphi_j(x)}{dx^2} + \left[\beta_j - \gamma A^2 \left(\frac{|\varphi_j(x)|^2}{x^2} \right) \right] \varphi_j(x) = 0. \quad (4.17)$$

Da condição de normalização (4.8) para $\phi(\mathbf{r})$, obtemos a normalização para $\varphi_j(x)$, definindo um número real C_{N_j} relacionado ao número de átomos N_j no estado condensado:

$$\int_0^\infty dx |\varphi_j(x)|^2 = C_{N_j}, \quad \text{onde } C_{N_j} = 2|a| \left(\frac{2mV_0}{\hbar^2} \right)^{1/2} N_j. \quad (4.18)$$

A expressão para energia total do sistema é dada por

$$E = \int_0^\infty \frac{1}{2|a|} \left[\frac{\hbar^2 V_0}{2m} \right]^{1/2} \left[\left| \frac{d\varphi_j(x)}{dx} \right|^2 - |\varphi_j(x)|^2 \mp \frac{|\varphi_j(x)|^4}{2x^2} \right] \quad (4.19)$$

para $x < x_0$. Na região $x > x_0$, tem-se uma expressão equivalente ao segundo termo em (4.19) igual a zero. Em (4.18) e (4.19) por conveniência escolhemos a constante de normalização A igual a $1/\sqrt{8\pi|a|}$.

O método numérico, assim como exemplos de soluções equivalentes para a equação GP com um potencial tipo oscilador harmônico são apresentadas em [15, 48], e para potenciais que crescem com uma lei de potências em [17].

4.3 Condições de contorno da função de onda

Para que a solução proposta em (4.9) fique bem definida na origem ($r = 0$), devemos ter que $\varphi(0) = 0$. Portanto, no limite quando $r \rightarrow 0$, $\phi(0) \rightarrow A\varphi'(0)$. Além disso, devido à descontinuidade do poço de potencial, separamos o espaço em duas regiões: para $x < x_0$ e para $x > x_0$, onde deve-se ter que em x_0 a função de onda do condensado e sua primeira derivada sejam contínuas, finitas e monovalentes. Essas exigências têm como consequência que a densidade de partículas $n = |\phi|^2$ e a densidade de corrente \mathbf{j} sejam finitas e contínuas em todo o espaço.

Ainda, já que estamos considerando estados de energia ligados, isto é, de energia negativa, é de esperar que a função de onda anule-se no infinito. Aqui vamos supor que existe um x_{\max} distante de x_0 , que imite o infinito, para o qual a função de onda é zero, $\varphi(x_{\max}) = 0$. O valor de x_{\max} será estimado quando implementarmos os programas numéricos.

Finalmente, dado que a equação para a função de onda do condensado é uma equação diferencial de segunda ordem em x , precisamos conhecer de duas condições iniciais, uma que já conhecemos para a função, $\varphi(0) = 0$ e a outra desconhecida para sua derivada $\varphi'(0)$. Então o problema é, começando com $\varphi(0) = 0$, determinar o valor do correspondente $\varphi'(0)$ que satisfaça a condição de contorno em x_{\max} .

4.4 Solução numérica da equação GP

O método numérico que vamos implementar permite encontrar as soluções para as equações adimensionais (4.13) e (4.17), que satisfazem as condições de contorno descritas anteriormente. Conhecida a condição $\varphi(0) = 0$ usamos os métodos “shooting” [36] e Runge-Kutta [35], dando a condição inicial $\varphi'(0)$ e propagando a solução em x , até encontrar o valor inicial que satisfaça a condição de contorno $\varphi(x_{\max}) = 0$.

Da maneira que escrevemos as equações (4.13) e (4.17), as soluções dependerão dos parâmetros β_j , γ e A . Dados os valores iniciais para $\varphi(0)$ e $\varphi'(0)$, quando todos os parâmetros tenham um valor numérico fixo atribuído, usamos o método Runge-Kutta para propagar em x a solução $\varphi(x)$. Porém, a solução não tem porque satisfazer a condição de contorno em x_{\max} , portanto, devemos variar $\varphi'(0)$ para encontrar o valor adequado. Dado que $\varphi(x)$ é uma função de $\varphi'(0)$, sendo desconhecida esta dependência de forma analítica, para encontrar o $\varphi'(0)$ que faz $\varphi(x)$ anular-se em x_{\max} usamos o método de bissecção, precisando para tal caso fornecer um intervalo $[\varphi'_0(0), \varphi'_1(0)]$ onde vamos achar com certeza o $\varphi'(0)$ que procuramos. O número de átomos no estado condensado N_j ficará determinado pela condição de normalização (4.18).

4.5 Resultados numéricos

Nesta seção apresentamos os resultados numéricos da equação GP para o potencial quadrado. Como exemplo, aqui analisamos alguns valores específicos dos parâmetros V_0 e r_0 , lembrando que o número de estados ligados no poço de potencial depende desses. Em particular, para que existam estados ligados:

$$V_0 r_0^2 > \frac{\hbar^2 \pi^2}{8m}. \quad (4.20)$$

Os resultados que vamos mostrar agora, trabalhamos com unidades adimensionais, serão aplicados a um gás de átomos de ^7Li , tal que $a = -1.45\text{nm}$. Na figura 4.1 exibimos o comportamento da função de onda do estado condensado $\phi(x)$ em função da distância radial adimensional x , para $V_0 = 4\alpha = 7.16 \times 10^{-14}$ eV sendo $\alpha = \hbar^2 \pi^2 / 8mr_0^2$ e escolhemos $r_0 = 5.76\mu\text{m}$, ou de maneira equivalente, $x_0 = 3.141$. Aqui fazemos o gráfico para diferentes valores do parâmetro β , o qual esta relacionado ao potencial químico pela equação (4.14), tendo em cada caso um número diferente de partículas no condensado. No eixo vertical temos $\phi(x) = A\varphi(x)/x$, no lugar de $\phi(r) = A\varphi(r)/r$. A linha partilhada da uma imagem pictórica da localização da fronteira do potencial quadrado.

Nas figuras 4.2 e 4.3 apresentamos novamente os gráficos da função de onda do estado condensado $\phi(x)$ em função da distância radial adimensional x , mas agora para $V_0 = 10\alpha = 1.79 \times 10^{-13}$ eV. Neste caso sabemos que existem dois estados ligados no poço de potencial com $\ell = 0$, o primeiro modo, figura 4.2, corresponde ao estado fundamental e o segundo modo, figura 4.3, corresponde a uma excitação não-linear do condensado para o mesmo potencial químico, mas com um número N_j de átomos condensados diferentes. Dado que N_j depende (além de β_j) de $\varphi_j(x)$, e este ultimo depende do $\varphi'(0)$ que reproduz a condição de contorno em x_{max} , no programa numérico a forma de encontrar os modos coerentes não-lineares do sistema é mediante a introdução do

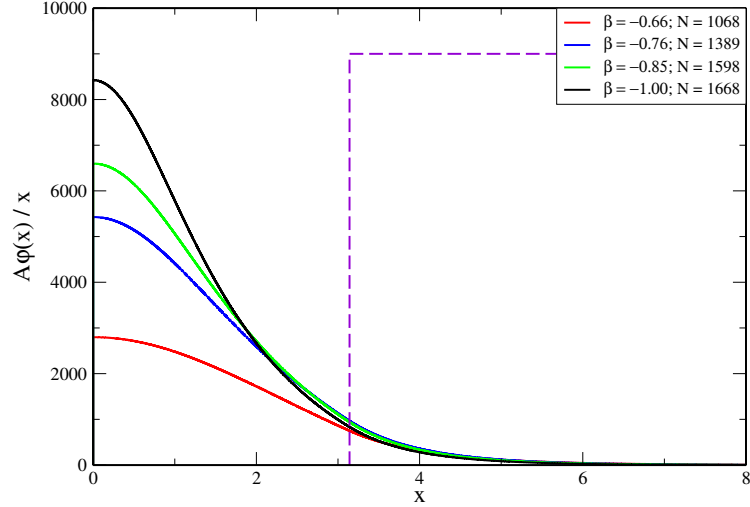


Figura 4.1: Função de onda do estado condensado $\phi(x)$, para diferentes valores do parâmetro β , com $V_0 = 7.16 \times 10^{-14} \text{eV}$ e $x_0 = 3.141$. A distância radial foi escalada em unidades de $(2mV_0/\hbar^2)^{1/2}$. O eixo vertical também foi escalado por este número.

intervalo $[\varphi'_0(0), \varphi'_1(0)]$. Na figura 4.4 mostramos mais um exemplo para o primeiro estado excitado com $\ell = 0$, $V_0 = 10\alpha$, com outros valores de β_j .

Como mencionamos anteriormente, a equação GP é uma equação de Schrödinger não-linear, portanto, exigimos da função de onda e da sua primeira derivada continuidade na fronteira do potencial, além disso, dado que esta função de onda corresponde a um estado ligado do potencial, esta vai a zero na região fora do potencial. Uma das particularidades notáveis das soluções encontradas nos exemplos anteriores, é a possibilidade de penetração da função de onda do condensado na barreira de potencial, um fenômeno quântico macroscópico com a particularidade de não ter um equivalente em um sistema clássico. Um cenário onde pode ser acessível experimentalmente a observação neste tipo de fenômeno é em um condensado de Bose-Einstein, fora da armadilha confinante. Um resultado interessante é mostrado na figura 4.5, onde mostramos um gráfico da função de onda do condensado, para $V_0 = 4\alpha$ e $\beta = -1.0$, variando a . Neste gráfico podemos ver que a penetração da função de onda, na barreira de potencial, pode ser ajustada

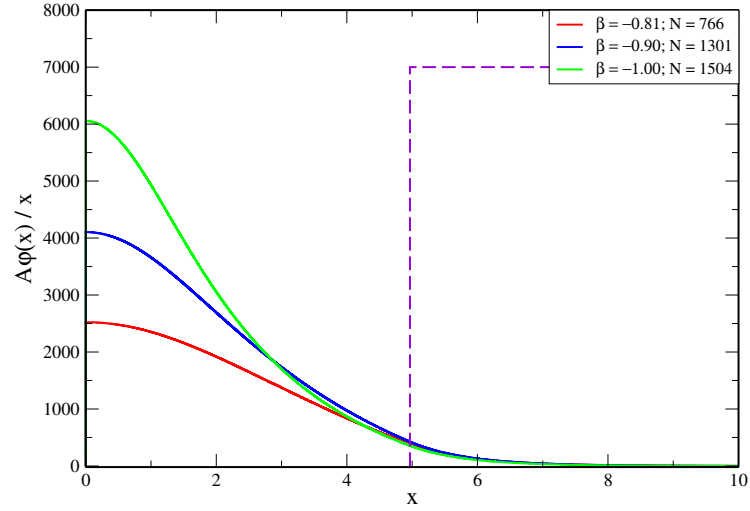


Figura 4.2: Função de onda do estado condensado $\phi(x)$ para o primeiro modo coerente com $\ell = 0$, isto para diferentes valores do parâmetro β . Aqui $V_0 = 1.79 \times 10^{-13}\text{eV}$ e $x_0 = 4.967$.

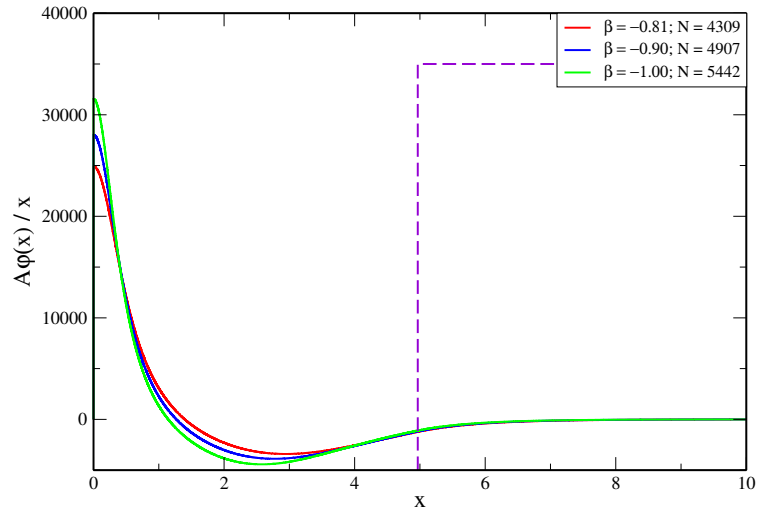


Figura 4.3: Função de onda do estado condensado, $\phi(x)$, para o segundo modo coerente com $\ell = 0$, isto para diferentes valores do parâmetro β . Aqui $V_0 = 1.79 \times 10^{-13}\text{eV}$ e $x_0 = 4.967$.

com o comprimento de espalhamento a . No caso de interação atrativa entre os átomos, quanto mais negativo seja o comprimento a , o alcance da penetração, assim como a

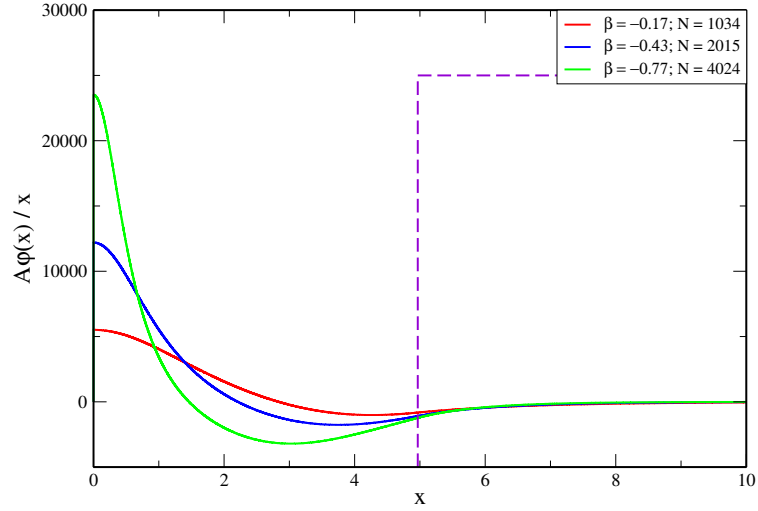


Figura 4.4: Função de onda do estado condensado, $\phi(x)$, para o segundo modo coerente com $\ell = 0$, isto para diferentes valores do parâmetro β . Aqui $V_0 = 1.79 \times 10^{-13} \text{eV}$ e $x_0 = 4.967$.

densidade de partículas, diminui.

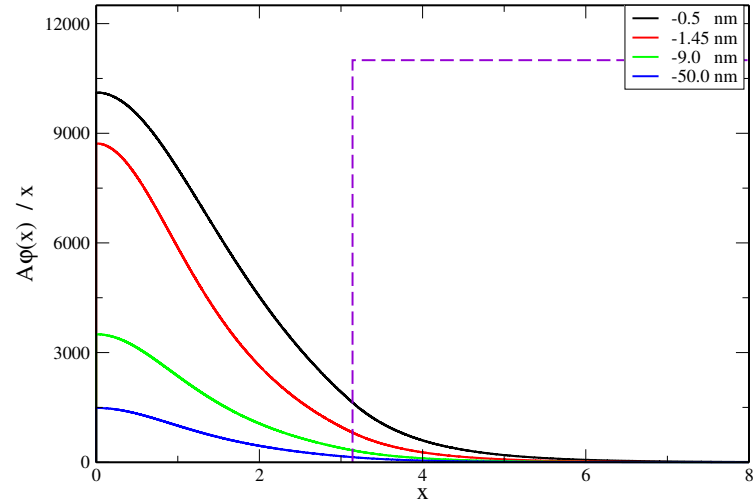


Figura 4.5: Função de onda do estado condensado, $\phi(x)$, para diferentes valores do comprimento de espalhamento a . Aqui $V_0 = 4\alpha$ e $x_0 = 3.141$.

Para estudar o comportamento da função de onda com uma variação espacial do com-

primento de espalhamento a , vamos considerar duas regiões: para $x < x_0$, onde $a = a_1$ e para $x > x_0$ onde $a = a_2$. Fixando o comprimento de espalhamento a_1 , na figura 4.6 mostramos a função de onda para diferentes valores de a_2 . Este gráfico é particularmente importante porque permite observar que a penetração da função de onda na barreira pode ser controlada com parâmetros externos. Por exemplo, por meio de ressonância Feshbach é possível, experimentalmente, ajustar o comprimento de espalhamento em muitas ordens de grandeza. Para destacar a diminuição, do alcance e da densidade de partículas, com o aumento do comprimento de espalhamento fora da barreira de potencial. Como é de esperar, as partículas sentem uma repulsão de fora para o interior do poço de potencial.

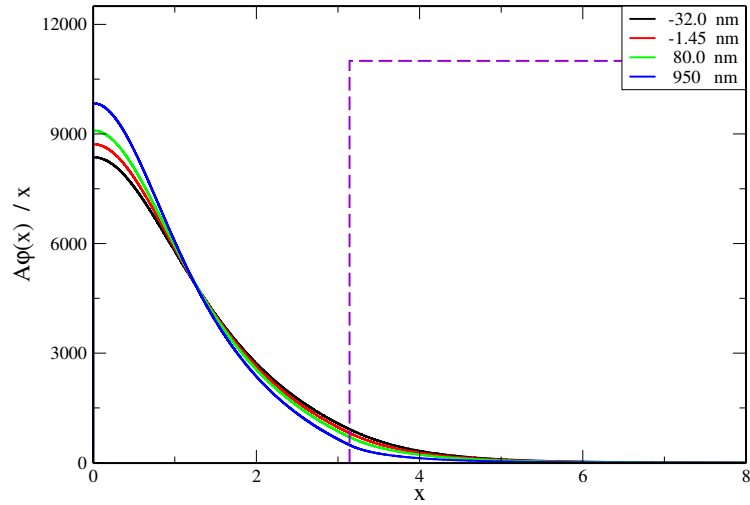


Figura 4.6: Função de onda do estado condensado $\phi(x)$ com uma variação espacial do comprimento de espalhamento, aqui $V_0 = 4\alpha$, tomando para $x < x_0$ um $a_1 = -1.45\text{nm}$ e para $x > x_0$ tomamos diferentes valores de a_2 conforme indicado na figura.

Uma grande diferença do sistema físico linear (gás não-interagente) é que, no caso linear, existe só um conjunto discreto de estados estacionários para determinados valores de β_j (modos lineares). Agora, no caso não-linear existe uma família de soluções

caracterizadas pela dependência de N com o valor de β^1 , sendo este um parâmetro contínuo [45]. Já que encontramos uma solução para $\varphi'(0)$ para um dado β , como passo seguinte vamos variar β em um $\Delta\beta$ para calcular um novo $\varphi'(0)$, e portanto, obter o N correspondente. Para exemplificar, vamos mostrar parcialmente alguns resultados nas tabelas 4.1 e 4.2.

β	$\varphi'(0)$	N
-0.73	0.0756889	25
-0.81	0.4816074	766
-0.89	0.7496289	1261
-0.97	1.0372528	1486
-1.05	1.3650011	1475
-1.13	1.7136329	1345
-1.21	2.0524434	1195
-1.29	2.3664375	1068
-1.37	2.6539831	966
-1.45	2.9181247	885

Tabela 4.1: Soluções numéricas da equação GP para o estado fundamental (com $\ell = 0$) de um potencial poço quadrado, com $a = -1.45\text{nm}$, $V_0 = 1.79 \times 10^{-13}\text{eV}$ e $x_0 = 4.967$. Aqui consideramos $x_{\max} = 15$.

Na figura 4.7 representamos o parâmetro β como função do número de átomos de ^7Li no estado condensado N . Os quatro gráficos são para diferentes valores da profundidade do poço de potencial, isto é, $V_0 = 2\alpha$, $V_0 = 3\alpha$, $V_0 = 4\alpha$ e $V_0 = 5\alpha$. Nesse gráfico é possível identificar varias características do sistema, em particular, notamos que para $a < 0$ existe um máximo de átomos N_{\max} que podemos condensar no estado fundamental. Em [49] é demonstrado que para o caso de um gás de bósons, confinado em um potencial tipo oscilador harmônico, com interações atrativas ($a < 0$) o sistema fica instável se o

¹Suprimimos o sub-índice para ressaltar que corresponde a um parâmetro contínuo.

β	$\varphi'(0)$	N
-0.03	0.0818024	13
-0.23	1.3273216	1291
-0.43	2.3286778	2015
-0.63	3.5645011	3049
-0.83	4.8878628	4448
-1.03	6.2346423	5566
-1.23	7.7604479	5847
-1.43	9.5159701	5350
-1.63	11.271435	4685
-1.83	12.877527	4158

Tabela 4.2: Soluções numéricas da equação GP para o primeiro estado excitado (com $\ell = 0$) de um potencial poço quadrado, com $a = -1.45\text{nm}$, $V_0 = 1.79 \times 10^{-13}\text{eV}$ e $x_0 = 4.967$. Aqui consideramos $x_{\max} = 15$.

número máximo de átomos condensados é atingido. Também é de ressaltar, a relação do N com a profundidade do poço, para maiores V_0 temos uma diminuição do número máximo de átomos que podemos aprisionar no potencial.

Para um poço quadrado de profundidade $V_0 = 10\alpha$, com dois estados ligados com momento angular igual a zero, representamos na figura 4.8 o potencial químico β como função do número de átomos no estado condensado N para os estados radiais, os quais correspondem aos estados de mais baixa energia com $\ell = 0$. Uma característica visível é o incremento do número N de átomos no condensado para o estado não-fundamental, comparado com o número de átomos condensados no estado fundamental para um mesmo β . De igual maneira, mostra-se um incremento do número máximo de átomos N_{\max} , embora no estado excitado este se apresenta para um β menor. A figura 4.9 mostra o comportamento, para diferentes V_0 , do potencial químico β como função do número de átomos no estado condensado N , mas agora no primeiro estado excitado

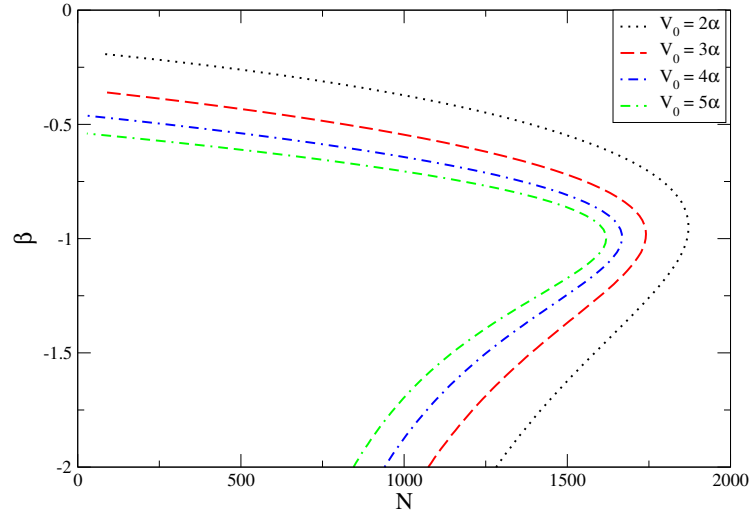


Figura 4.7: Potencial químico normalizado β como função do número de átomos condensados N no estado fundamental, para diferentes valores da profundidade V_0 do poço de potencial quadrado.

com $\ell = 0$.

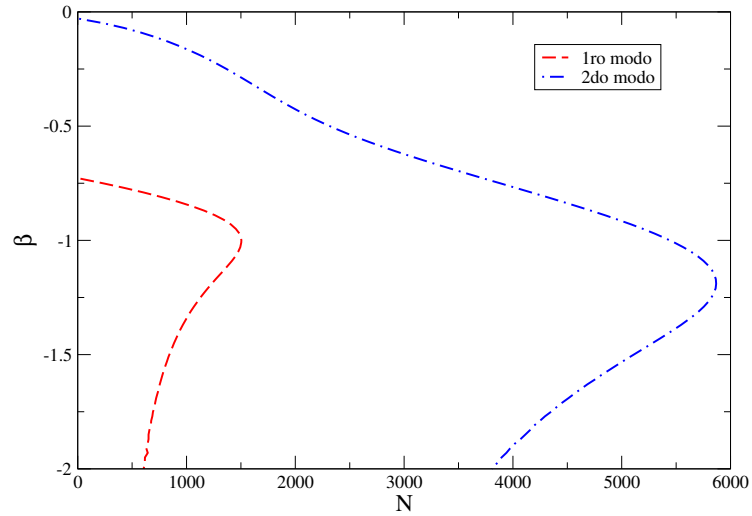


Figura 4.8: Potencial químico normalizado β como função do número de átomos condensados N , no estado fundamental (cor vermelho) e no primeiro estado excitado (cor azul), para $V_0 = 10\alpha$ e $a = -1.45\text{nm}$.

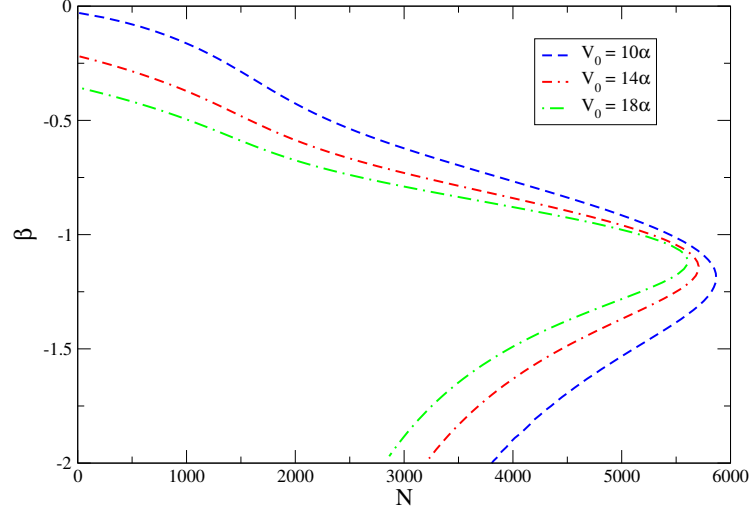


Figura 4.9: Potencial químico normalizado β em função do número de partículas no estado condensado N , para o primeiro estado excitado com $\ell = 0$. Aqui consideramos diferentes valores de V_0 e $a = -1.45\text{nm}$.

Voltando ao fenômeno de penetração da função de onda na barreira de potencial, uma quantidade que queremos analisar, em termos dos parâmetros do sistema, é a razão N_i/N_e , entendendo N_i como número de átomos condensados no interior do potencial, $x < x_0$, e N_e o número de átomos condensados no exterior, $x > x_0$. Fazemos isto como função do potencial químico normalizado β , para o primeiro e segundo modo coerente com $\ell = 0$ (figura 4.10) e para o primeiro modo com diferentes valores de V_0 (figura 4.11). Podemos notar que a razão aumenta no segundo modo, uma possível explicação deve-se a que é menor a penetração da função de onda na barreira para os modos superiores, o que traduz uma redução no N_e . Também é de notar a diminuição da razão com o aumento da profundidade do poço, consistente com o fato que o número máximo de partículas que podemos condensar também diminui.

Agora bem, no que segue queremos analisar a situação quando $a > 0$. Vamos tomar átomos de ^{85}Rb , tal que $a = 5.80\text{nm}$. Assim, na figura 4.12 fazemos o gráfico do parâmetro β como função do número de partículas N no estado fundamental, para diferentes va-

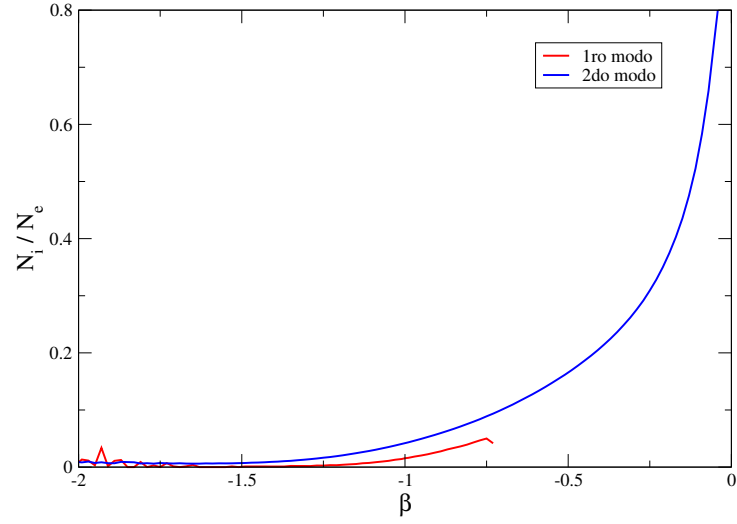


Figura 4.10: N_i/N_e como função do potencial químico normalizado β , para os dois primeiros modos coerentes com $\ell = 0$. Aqui consideramos $V_0 = 10\alpha$.

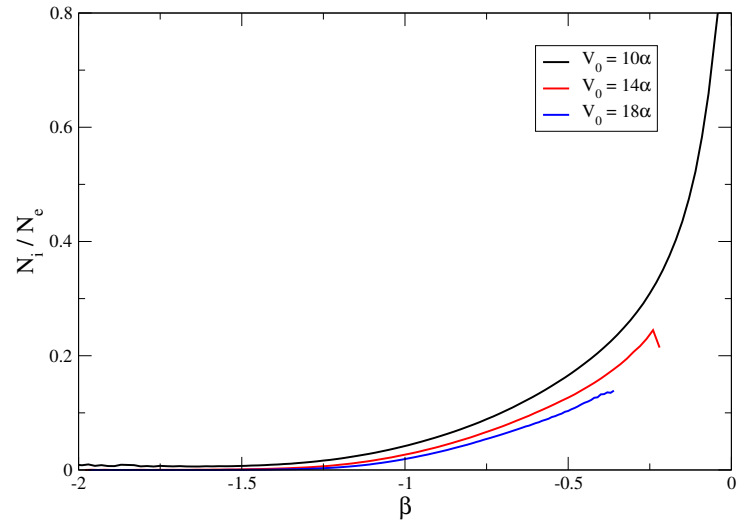


Figura 4.11: N_i/N_e em função do potencial químico normalizado β , para o segundo modo coerente com $\ell = 0$. Aqui consideramos diferentes valores de V_0 .

lores de V_0 . Uma diferença fundamental aparece neste momento para a situação em

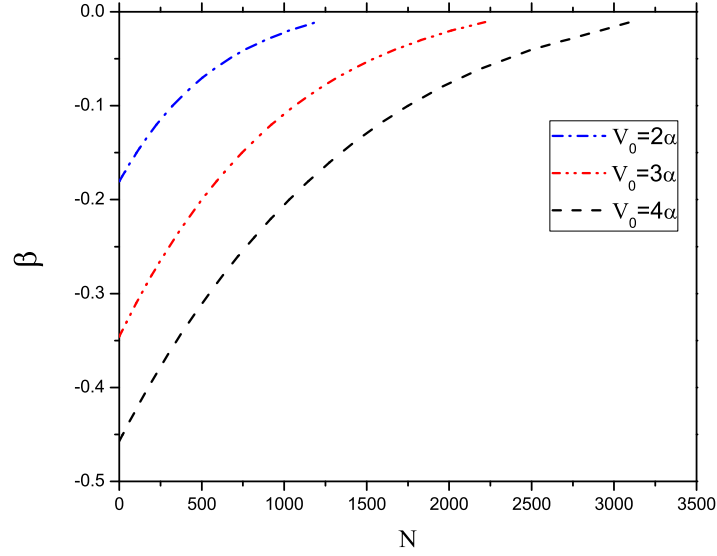


Figura 4.12: Potencial químico em função do número de partículas no estado condensado para diferentes valores de V_0 , com $a = 5.80\text{nm}$

que $a < 0$, aqui não existe um número máximo de partículas N_{max} aprisionadas no poço de potencial, de fato, o número de partículas condensadas incrementa-se com o potencial químico ao igual que com a profundidade do poço de potencial. Quando N é igual a zero, o valor atingido corresponde à razão μ/V_0 para o caso de um gás de átomos não-interagente, e a partir desse começa a ser incrementado. Nós calculamos para β negativos, isto é, quando $\mu < 0$. Para β positivos, $\mu > 0$, fala-se de soluções parcialmente localizadas, tal que a função de onda vai para um valor constante diferente de zero, no infinito. Portanto, estes tipos de soluções correspondem a estados não normalizáveis e não serão levados em conta neste análise.

Capítulo **5**

SOLUÇÕES VÓRTICE E ANTI-VÓRTICE DA EQUAÇÃO GP

Temos trabalhado até agora com um gás de bósons em um potencial quadrado finito, fracamente confinante. Neste capítulo vamos construir para o mesmo gás de bósons, mas confinado em um poço de potencial tipo oscilador harmônico isotrópico, umas soluções dependentes do tempo para a equação GP. Uma superposição de soluções, uma estacionária e uma solução exata deslocada espacialmente, da equação de Schrödinger linear, vai permitir gerar estados vórtice e anti-vórtice no sistema.

5.1 Solução exata da Equação de Schrödinger linear

Examinemos a equação de GP,

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{r}, t) + \frac{m\omega^2}{2} \mathbf{r}^2 \psi(\mathbf{r}, t) + g|\psi|^2 \psi(\mathbf{r}, t), \quad (5.1)$$

com um potencial harmônico $m\omega^2 \mathbf{r}^2/2$. Por conveniência, vamos trabalhar em unidades de $\hbar = 1$ e $m = 1$. Se $\psi(\mathbf{r}, t)$ é uma solução da Eq. (5.1) que satisfaz $\psi(\mathbf{r}, t = 0) = \xi(\mathbf{r})$,

então $\psi_{\mathbf{R}}(t, \mathbf{r})$ dado pelo ansatz

$$\psi_{\mathbf{R}}(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r} - \mathbf{R}(t), t) \exp[i\mathbf{R}_t \cdot \mathbf{r} + \Theta(t)], \quad (5.2)$$

é também uma família de soluções de (5.1), sendo $\mathbf{R}_t \cdot \mathbf{r}$ o produto escalar dos vetores \mathbf{R}_t e \mathbf{r} . A solução é construída por meio de uma translação espacial do centro do pacote de onda, que é a solução existente de (5.1). Uma demonstração formal é realizada em [34] onde a expressão (5.2) é inserida na Eq. (5.1). $\mathbf{R}(t)$ é uma trajetória clássica do centro do pacote, determinada pela solução de

$$\mathbf{R}_{tt} + \omega^2 \mathbf{R} = 0, \quad (5.3)$$

com \mathbf{R}_t e \mathbf{R}_{tt} , a primeira e segunda derivada temporal de \mathbf{R} respectivamente, e $\Theta(t)$ é uma fase determinada por

$$\Theta(t) = -\frac{1}{4\omega} \mathbf{W}^2 + \frac{\omega}{2} \mathbf{R}^2, \quad \text{com} \quad \mathbf{W} = \omega \mathbf{R} + i\mathbf{R}_t. \quad (5.4)$$

O ansatz dado na Eq. (5.2) é aplicável, em geral, para algum tipo de não linearidade que seja simétrica sob translações espaciais e que dependa somente da norma da função de onda, em nosso caso, analiticamente só pode ser provado no limite da equação de Schrödinger linear, em parte, devido à ausência de soluções exatas no regime não-linear. Começamos com $g = 0$ na Eq. (5.1). Assim,

$$i \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\frac{1}{2} \nabla^2 \psi(\mathbf{r}, t) + \frac{\omega^2}{2} \mathbf{r}^2 \psi(\mathbf{r}, t). \quad (5.5)$$

Para continuar procedemos à construção da solução deslocada espacialmente $\psi_{\mathbf{R}}(t, \mathbf{r})$, iniciando com uma solução exata de (5.5) que escrevemos como:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \psi_{\text{gauss}}(\mathbf{r}, t)\Phi(\mathbf{r}, t) \quad (5.6)$$

da qual separamos a envolvente gaussiana $\psi_{\text{gauss}}(\mathbf{r}, t)$,

$$\psi_{\text{gauss}}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \exp\left[-i\frac{D}{2}\omega t - \frac{\omega}{2}\mathbf{r}^2\right], \quad (5.7)$$

correspondente ao estado fundamental da equação de Schrödinger com um potencial harmônico D-dimensional. A família de soluções de (5.2), associadas a $\psi(\mathbf{r}, t)$, as escrevemos como

$$\psi_{\mathbf{R}}(\mathbf{r}, t) = \psi_{\text{gauss}}(\mathbf{r} - \mathbf{R}, t)\Phi(\mathbf{r} - \mathbf{R}, t) \exp[i\mathbf{R}_t \cdot \mathbf{r} + \Theta(t)], \quad (5.8)$$

onde o pacote de onda inteiro está se movendo ao longo de uma trajetória clássica, conservando sua forma. Notando que

$$\psi_{\text{gauss}}(\mathbf{r} - \mathbf{R}, t) = \psi_{\text{gauss}}(\mathbf{r}, t) \exp\left[\omega \mathbf{r} \cdot \mathbf{R} - \frac{\omega}{2}\mathbf{R}^2\right], \quad (5.9)$$

A transformação (5.8) é reescrita

$$\psi_{\mathbf{R}}(\mathbf{r}, t) = \psi_{\text{gauss}}(\mathbf{r}, t)\Phi(\mathbf{r} - \mathbf{R}, t) \exp\left[i\left(\mathbf{W} \cdot \mathbf{r} - \frac{1}{2}\mathbf{W} \cdot \mathbf{R}\right) + \frac{1}{2\omega}K\right], \quad (5.10)$$

com

$$K = \frac{1}{2} \mathbf{R}_t \cdot \mathbf{R}_t + \frac{\omega^2}{2} \mathbf{R} \cdot \mathbf{R} \quad (5.11)$$

A equação (5.3) tem duas constantes de movimento, a energia K e o vetor momento angular $\mathbf{M} = \mathbf{R} \times \mathbf{R}_t$, sendo $\mathbf{R} \times \mathbf{R}_t$ o produto vetorial de \mathbf{R} e \mathbf{R}_t .

A solução geral de (5.3) é dada por

$$\mathbf{R}(t) = \mathbf{A} \cos \omega t + \mathbf{B} \sin \omega t, \quad (5.12)$$

com \mathbf{A} e \mathbf{B} constantes. Desta forma, K e \mathbf{M} são dadas em termos de \mathbf{A} e \mathbf{B} por

$$K = \frac{\omega^2}{2} (\mathbf{A}^2 + \mathbf{B}^2) \quad \text{e} \quad \mathbf{M} = \omega \mathbf{A} \times \mathbf{B}, \quad (5.13)$$

e

$$\mathbf{W} = \mathbf{W}_0 \exp(-i\omega t) \quad \text{com} \quad \mathbf{W}_0 = \omega(\mathbf{A} + i\mathbf{B}) = \text{constante}. \quad (5.14)$$

5.1.1 Soluções estacionárias

Substituindo a solução (5.6) na Eq. (5.5), obtemos uma equação para $\Phi(\mathbf{r}, t)$,

$$i \frac{\partial \Phi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\omega \mathbf{r} \cdot \nabla \Phi(\mathbf{r}, t) + \frac{1}{2} \nabla^2 \Phi(\mathbf{r}, t). \quad (5.15)$$

Uma solução estacionária para a Eq. (5.5) é obtida para

$$\Phi_{\text{gauss}}(\mathbf{r}, t) = 1. \quad (5.16)$$

Estamos interessados em construir soluções de estrutura vórtice para a equação de Gross-Pitaevskii. Assim, este tipo de solução pode ser expandida em uma base completa do espaço de Hilbert em consideração. Por conveniência, em geral, é usada a base de autoestados do oscilador harmônico [50]. Agora, se pensamos em um potencial oscilador harmônico fracamente confinante na dimensão z , estados vórtice desse sistema, de momento angular ℓ , podem ser escritos como

$$\psi(r, t) = e^{-i\Omega t} e^{i\ell\theta} \frac{e^{-r^2/2}}{\sqrt{\pi}} r^\ell L_n^\ell(r^2), \quad (5.17)$$

onde r e θ são coordenadas polares, isto é,

$$x = r \cos \theta, \quad y = r \sin \theta, \quad (5.18)$$

Ω a frequência de rotação do vórtice, n é o número quântico radial ($n = 0, 1, 2, \dots$), ℓ um inteiro associado ao momento angular, conhecido como a ordem (ou carga topológica) do vórtice e L_n^ℓ os polinômios associados de Laguerre. Deste modo, para $|\ell| = 1$ e para $\Omega = \omega$, ω a frequência do potencial harmônico, podemos escrever o estado da forma geral

$$\Phi_{\text{vórtice}}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{b} \cdot \mathbf{r} e^{-i\omega t} \quad \text{com} \quad \mathbf{b} = \text{constante}. \quad (5.19)$$

O sinal do ℓ indica o sentido da rotação, portanto, vamos distinguir os estados vórtice quando ℓ seja positivo, e estados anti-vórtice quando ℓ seja negativo.

5.1.2 Solução deslocada espacialmente

Nosso objetivo é construir uma solução exata da Eq. (5.5) por translações espaciais, procurando por um mecanismo de geração de estados vórtice. Analizamos a situação mais simples, uma superposição de uma solução estacionária e a solução gaussiana deslocada (com $\Phi(\mathbf{r}, t) = \Phi_{\text{gauss}}(\mathbf{r}, t)=1$). Deste modo,

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi_{\text{gauss}}(\mathbf{r}, t) \left\{ \Phi_{\text{estacionária}}(\mathbf{r}, t) + \varepsilon \exp \left[i \left(\mathbf{W} \cdot \mathbf{r} - \frac{1}{2} \mathbf{W} \cdot \mathbf{R} \right) + \frac{1}{2\omega} K \right] \right\}. \quad (5.20)$$

com ε uma constante. Escolhendo

$$\mathbf{A} = (a_0, 0, 0), \quad \mathbf{B} = (0, a_0, 0), \quad (5.21)$$

então a solução gaussiana fica girando em um círculo, no plano bidimensional $x - y$, de raio $|\mathbf{r}| = a_0$. Neste caso, a Eq. (5.10) pode-se escrever como

$$\psi_{\mathbf{R}}(\mathbf{r}, t) = \psi_{\text{gauss}}(\mathbf{r}, t) \exp \left\{ \omega a_0 (x + iy) e^{-i\omega t} \right\}. \quad (5.22)$$

A escolha das constantes \mathbf{A} e \mathbf{B} foi realizada por conveniência, porém o sistema inicial é convertido em um sistema bidimensional, sob a suposição de uma armadilha harmônica fracamente confinante na direção z .

5.2 Superposição de um estado vórtice com a solução gaussiana deslocada

Uma solução estacionária da Eq. (5.5) é dada por (5.19), correspondendo a um estado vórtice

$$\psi_v(\mathbf{r}, t) = \psi_{\text{gauss}}(\mathbf{r}, t)(x + iy) \exp(-i\omega t). \quad (5.23)$$

Em vista disto, estudamos a superposição das soluções (5.22) and (5.23), isto é, solução estacionária mais a solução gaussiana deslocada,

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi_{\text{gauss}}(\mathbf{r}, t) \left\{ (x + iy)e^{-i\omega t} - \varepsilon \exp[\omega a_0(x + iy)e^{-i\omega t}] \right\}, \quad (5.24)$$

onde por conveniência foi mudada o sinal que acompanha ε em (5.20). Estados vórtice são equivalentes a zeros na densidade de partículas. Assim, os zeros da função de onda (5.24) são dados por

$$X_k(t) + iY_k(t) = \frac{\zeta_k}{\omega a_0} e^{-i\omega t}, \quad (5.25)$$

onde ζ_k , $k = 1, 2, \dots$, são soluções complexas da equação

$$\zeta e^{-\zeta} = \omega a_0 \varepsilon, \quad (5.26)$$

Em (5.26), $\zeta = \zeta_x + i\zeta_y$ é um sistema de coordenadas fixo, o qual está relacionado por (5.25) com o sistema de coordenadas físico $x-y$, que encontra-se girando com frequência

ω . Deve-se notar que nessa situação, existe um número infinito de estados vórtice, porém, não é muito interessante porque o sistema não oferece nenhuma dinâmica, as linhas vórtice estão fixas todo o tempo no sistema $\zeta_x - \zeta_y$ e simplesmente permanecem girando no plano coordenado $x - y$.

5.3 Superposição de um estado anti-vórtice com a solução gaussiana deslocada

Em um segundo caso vamos considerar a superposição de um estado anti-vórtice, solução estacionária (5.19) da equação de Schrödinger linear (5.5), dado por

$$\psi_a(\mathbf{r}, t) = \psi_{\text{gauss}}(\mathbf{r}, t)(x - iy) \exp(-i\omega t), \quad (5.27)$$

e a solução gaussiana deslocada (5.22). Portanto,

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi_{\text{gauss}}(\mathbf{r}, t) \left\{ (x - iy) \exp(-i\omega t) - \varepsilon \exp[\omega a_0(x + iy)e^{-i\omega t}] \right\}, \quad (5.28)$$

e os seus zeros estão contidos na relação

$$X_k(t) + iY_k(t) = \frac{\zeta_k}{\omega a_0} e^{-i\omega t}, \quad (5.29)$$

onde ζ_k , $k = 1, 2, \dots$, são soluções complexas da equação

$$\bar{\zeta} e^{-\zeta} = \rho e^{2i\omega t}, \quad \rho = \omega a_0 \varepsilon. \quad (5.30)$$

Este resultado é muito interessante, porque diferentemente da situação anterior, temos um número infinito de linhas vórtice com uma dinâmica não-trivial, produto da dependência temporal das soluções da Eq. (5.30). Temos três casos a analisar:

- I. $\rho < e^{-1}$
- II. $\rho > e$
- III. $e^{-1} < \rho < e$

O primeiro caso ($\rho < e^{-1}$) é demonstrado na figura 5.1, onde temos uma linha vórtice girando em uma trajetória periódica e uma cadeia infinita de linhas vórtice transitando uma depois da outra. A linha no trajeto circular representa um estado anti-vórtice ($\ell = -1$), como pode ser verificado na figura 5.2, onde aparece a fase da função de onda (5.28) em algum t . No segundo caso, ($\rho > e$), temos só a cadeia infinita de linhas vórtice, figura 5.3, ali encontram-se transitando também uma a continuação da outra. Para um t particular, apresentamos a fase da função de onda (5.28) na figura 5.4.

O caso mais curioso é o terceiro ($e^{-1} < \rho < e$) exibido na figura 5.5, onde vemos, além da cadeia de linhas vórtice, a criação de uma parilha vórtice e anti-vórtice em um tempo t_1 , seguida de uma aniquilação em um tempo t_2 posterior. Em outras palavras, temos um vórtice virtual que aparece e logo desaparece. O movimento da linha anti-vórtice é oposto à direção em que as linhas vórtice estão transitando. Para um t particular, apresentamos o gráfico da fase da função de onda (5.28) na figura 5.6, onde é verificada a existência das linhas vórtice e anti-vórtice.

O comportamento dinâmico da solução depende das condições iniciais do sistema, em particular das constantes A e B . Por exemplo, se escolhemos

$$\mathbf{A} = (a_0, 0, 0), \quad \mathbf{B} = (0, -a_0, 0), \quad (5.31)$$

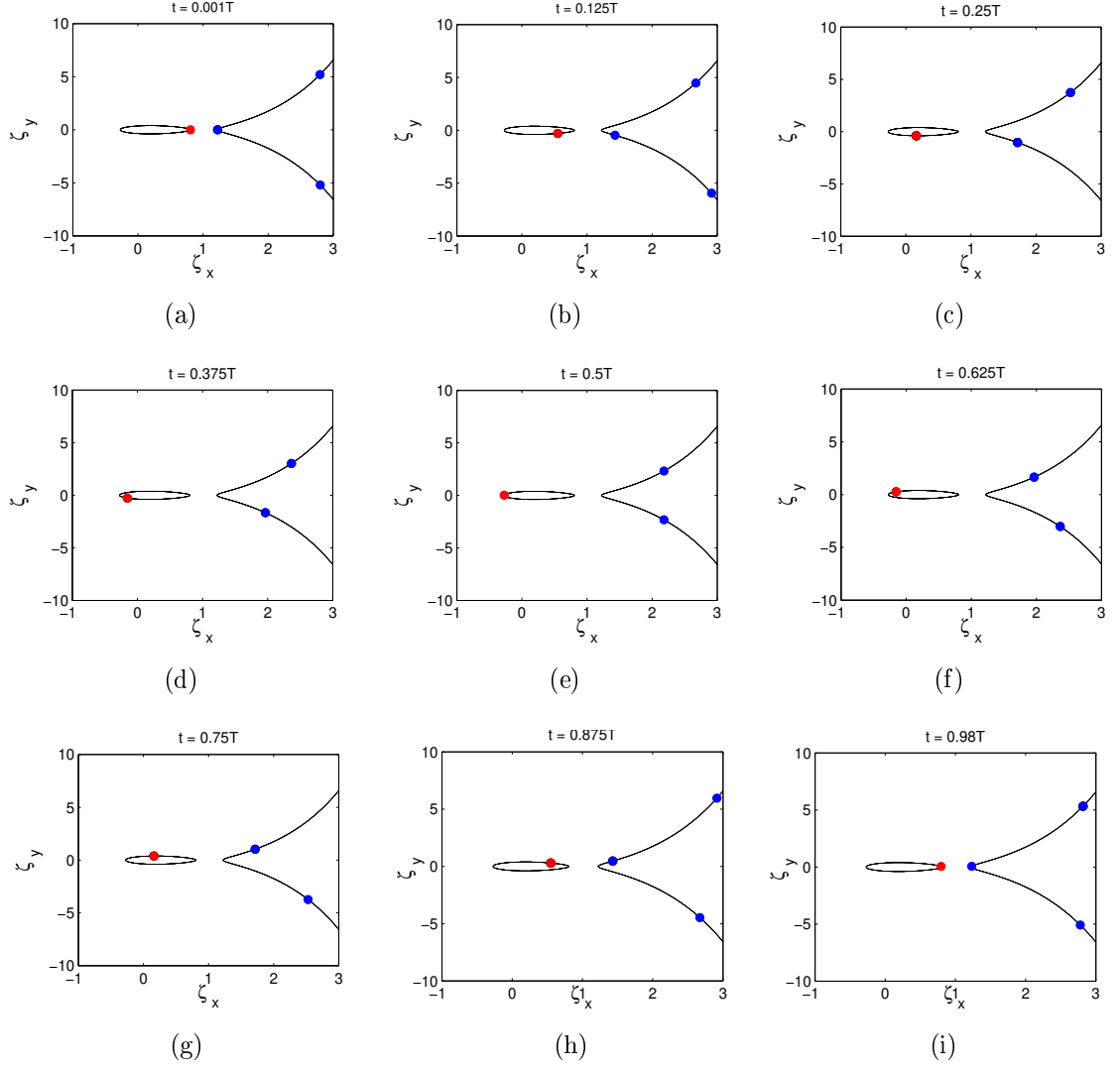


Figura 5.1: Gráfico dos zeros da função de onda $\Psi(t, \mathbf{r})$ solução de (5.28), para $\rho = 0.36$ em diferentes valores de t . As linhas vórtice são representadas por círculos azuis e a linha anti-vórtice por círculos da cor vermelha.

então

$$\mathbf{R}(t) = a_0 \cos \omega t \hat{x} - a_0 \sin \omega t \hat{y}, \quad (5.32)$$

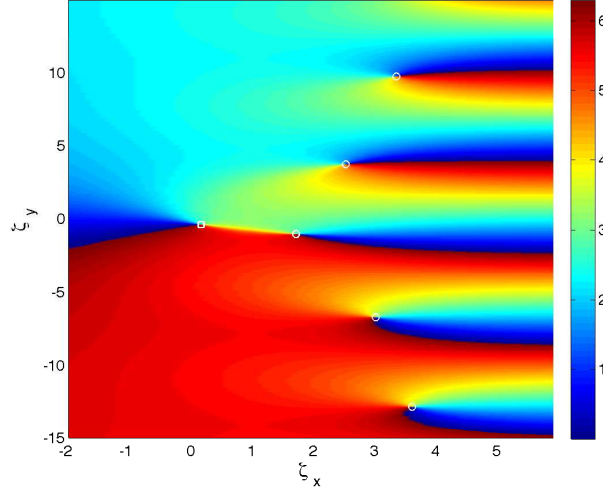


Figura 5.2: Gráfico 2D da fase da função de onda $\Psi(\mathbf{r}, t)$ em (5.24), para $\rho = 0.36$ e $t = 0.25T$. A localização dos estados vórtice são distinguidos por círculos brancos e o estado anti-vórtice com um quadrado.

com

$$\mathbf{R}(0) = a_0 \hat{x}, \quad \mathbf{R}_t(0) = -a_0 \omega \hat{y}. \quad (5.33)$$

Isto é, a gaussiana também giraria no plano $x - y$ em um círculo de raio $|\mathbf{r}| = a_0$, mas nessa configuração sua velocidade estaria na direção contrária a (5.22),

$$\psi_{\mathbf{R}}(\mathbf{r}, t) = \psi_{\text{gauss}}(\mathbf{r}, t) \exp \left\{ \omega a_0 (x - iy) e^{-i\omega t} \right\}, \quad (5.34)$$

nessa situação, o problema que vai adquirir uma dinâmica não-trivial será a superposição da gaussina deslocada com uma linha vórtice.

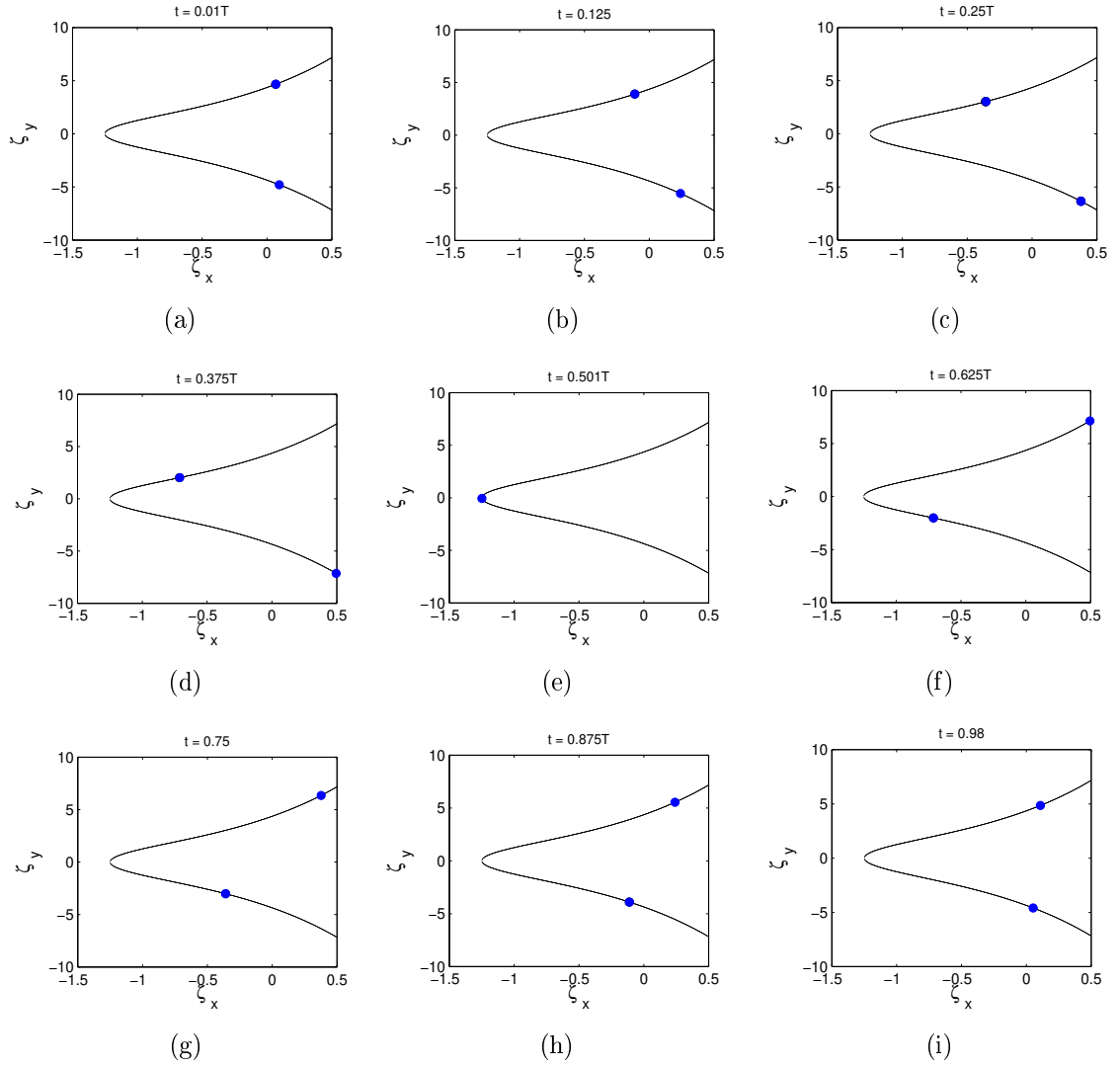


Figura 5.3: Gráfico dos zeros da função de onda $\Psi(t, \mathbf{r})$ solução de (5.28), para $\rho = 4.36$ em diferentes valores de t . As linhas vórtice são representadas por círculos azuis.

5.4 Superposição de uma linha vórtice com uma gaussiana na direção z

Modificando as condições iniciais,

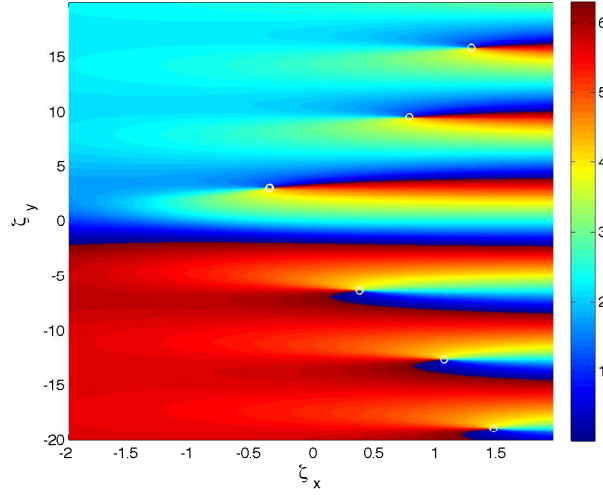


Figura 5.4: Gráfico 2D da fase da função de onda $\Psi(\mathbf{r}, t)$ em (5.24), para $\rho = 4.36$ e $t = 0.25T$. A localização dos estados vórtice são distinguidos por círculos brancos.

$$\mathbf{A} = (0, 0, A), \quad \mathbf{B} = (0, 0, 0), \quad (5.35)$$

vamos considerar uma gaussiana deslocada na direção z ,

$$\psi_{\mathbf{R}} = \psi_{\text{gauss}}(\mathbf{r}, t) \exp[\omega A z e^{-i\omega t} - \frac{\omega}{4} A^2 e^{-2i\omega t}] \quad (5.36)$$

tal que a superposição com o estado vórtice da Eq. (5.23) escreve-se como

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi_{\text{gauss}}(\mathbf{r}, t) \left\{ (x + iy) e^{-i\omega t} - \varepsilon \exp[\omega A z e^{-i\omega t} - \frac{\omega}{4} A^2 e^{-2i\omega t}] \right\}. \quad (5.37)$$

onde ε pode ser um número complexo. Neste caso, os zeros de (5.38) são localizados em uma trajetória 3D,

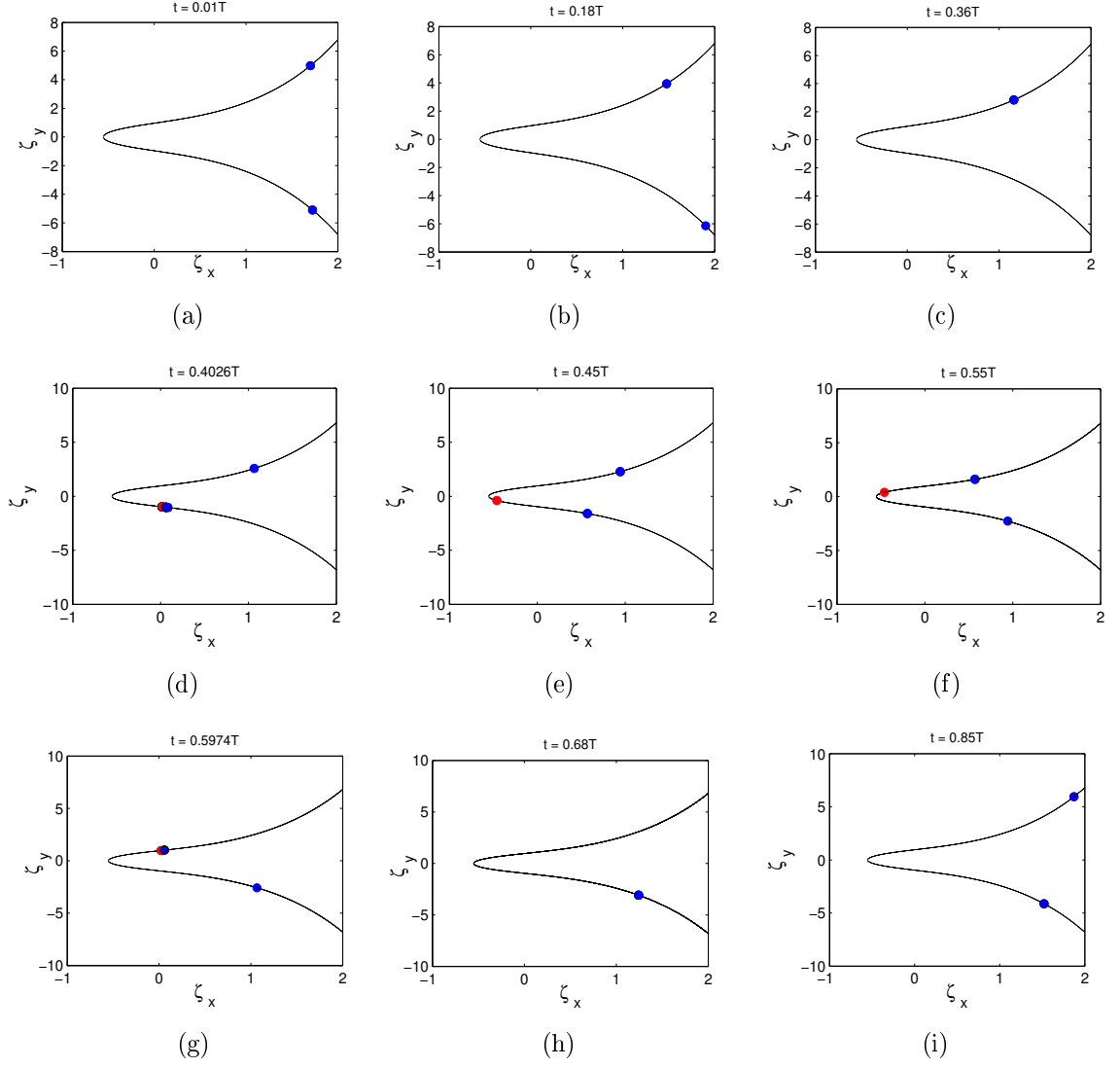


Figura 5.5: Gráfico dos zeros da função de onda $\Psi(t, \mathbf{r})$ solução de (5.28), para $\rho = 0.96$ em diferentes valores de t . As linhas vórtice são representadas por círculos azuis e a linha anti-vórtice por círculos da cor vermelha.

$$\rho e^{i\phi} = \epsilon e^{i\omega t} \exp\left[\omega A z e^{-i\omega t} - \frac{\omega}{4} A^2 e^{-2i\omega t}\right], \quad (5.38)$$

onde

$$x = X(z, t) = \rho(z, t) \cos \varphi(z, t), \quad y = Y(z, t) = \rho(z, t) \sin \varphi(z, t), \quad (5.39)$$

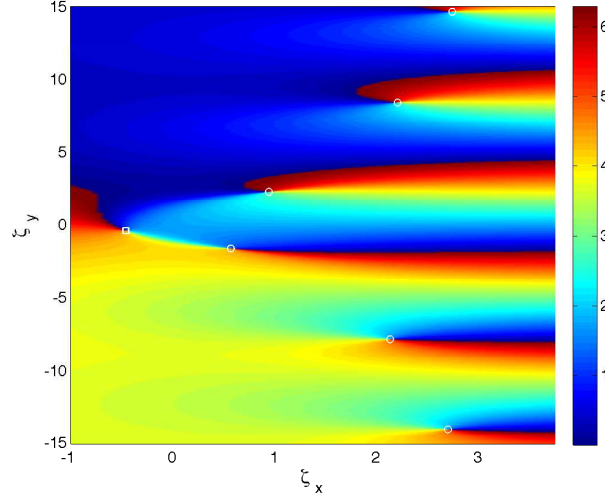


Figura 5.6: Gráfico 2D da fase da função de onda $\Psi(\mathbf{r}, t)$ em (5.24), para $\rho = 0.96$ e $t = 0.45T$. A localização dos estados vórtice são distinguidos por círculos brancos e o estado anti-vórtice com um quadrado.

com $\rho(z, t)$, z e $\varphi(z, t)$ coordenadas cilíndricas. Assim obtemos,

$$\rho(z, t) = \rho_0 \exp\{\omega A[z - z_0(t)] \cos \omega t\}, \quad (5.40)$$

$$\varphi(z, t) = \varphi_0 + \omega t - \omega A[z - z_0(t)] \sin \omega t, \quad (5.41)$$

onde

$$\rho_0 = |\varepsilon| \exp\left(\frac{\omega}{4} A^2\right), \quad \varphi_0 = \arg \varepsilon \quad \text{e} \quad z_0(t) = \frac{1}{2} A \cos \omega t. \quad (5.42)$$

Um gráfico 3D dos zeros da função de onda $\Psi(\mathbf{r}, t)$ em (5.38) é demonstrada na figura 5.7, no plano $x - y - z$ temos uma trajetória similar a uma função tipo “látigo”.

A fase φ tem um periodo igual a 2π no tempo, além de isso, para algum t a fase φ é também periódica em z , assim

$$\varphi(t, z + h(t)) = \varphi(t, z), \quad (5.43)$$

sendo $h(t)$ dado por

$$h(t) = \frac{2\pi}{\omega A |\sin \omega t|}. \quad (5.44)$$

Em (5.44) existe um h_{min} tal que

$$h_{min} = \frac{2\pi}{\omega A} \leq h(t) < \infty. \quad (5.45)$$

5.5 Equação de Schrödinger não-linear

Uma interessante questão está orientada ao que acontece no regime não linear, isto é $g \neq 0$. Porém, este não é um problema trivial devido à ausência de soluções analíticas para a equação GP. Apresentamos algumas soluções numéricas obtidas a partir de simulações computacionais baseadas nos métodos de decomposição “split-step” e FFT. A figura 5.8 apresenta o quadrado da norma da função de onda solução da Eq. (5.1) no plano $x - y$, para $g = 20$ em diferentes tempos. A solução é construída a partir da solução (5.28) à equação linear, com $\rho = 0.36$.

Agora, encontrar os zeros da função de onda é uma tarefa, desde o ponto de vista numérico, bastante complicada. Em parte, porque no caso linear temos separado o fator exponencial $\psi_{\text{gauss}}(\mathbf{r}, t)$ da solução, no problema não-linear temos soluções que caem

rapidamente a zero, e portanto, devido ao erro intrínseco do método computacional, os zeros da função de onda são superpostos com o ruído numérico. Em uma pequena região do sistema coordenado $\zeta_x - \zeta_y$, é possível identificar os zeros da função de onda, figura 5.9, para pequenos valores de g , isto é $g = 0.5$ e $g = 0.75$. Comparamos com o caso linear, observando uma expansão da trajetória circular seguida pelo estado anti-vórtice no caso de $\rho = 0.24 < e^{-1}$.

Para finalizar cabe indicar que ficam algumas questões abertas relacionadas ao limite não-linear, a mais interessante está encaminhada ao que acontece com o par vórtice-anti-vórtice, pode ser que neste caso exista a possibilidade de evitar a aniquilação. Porém, pensamos que provavelmente sobrevive o efeito de um número de estados vórtice infinito no sistema, claro que é de esperar que sua distribuição no espaço não seja homogênea. Com a tecnologia BEC atual este seria um interessante mecanismo para a geração de vórtices em um condensado de Bose-Einstein, sendo factível uma verificação experimental do resultado teórico no limite de um gás fracamente interagente.

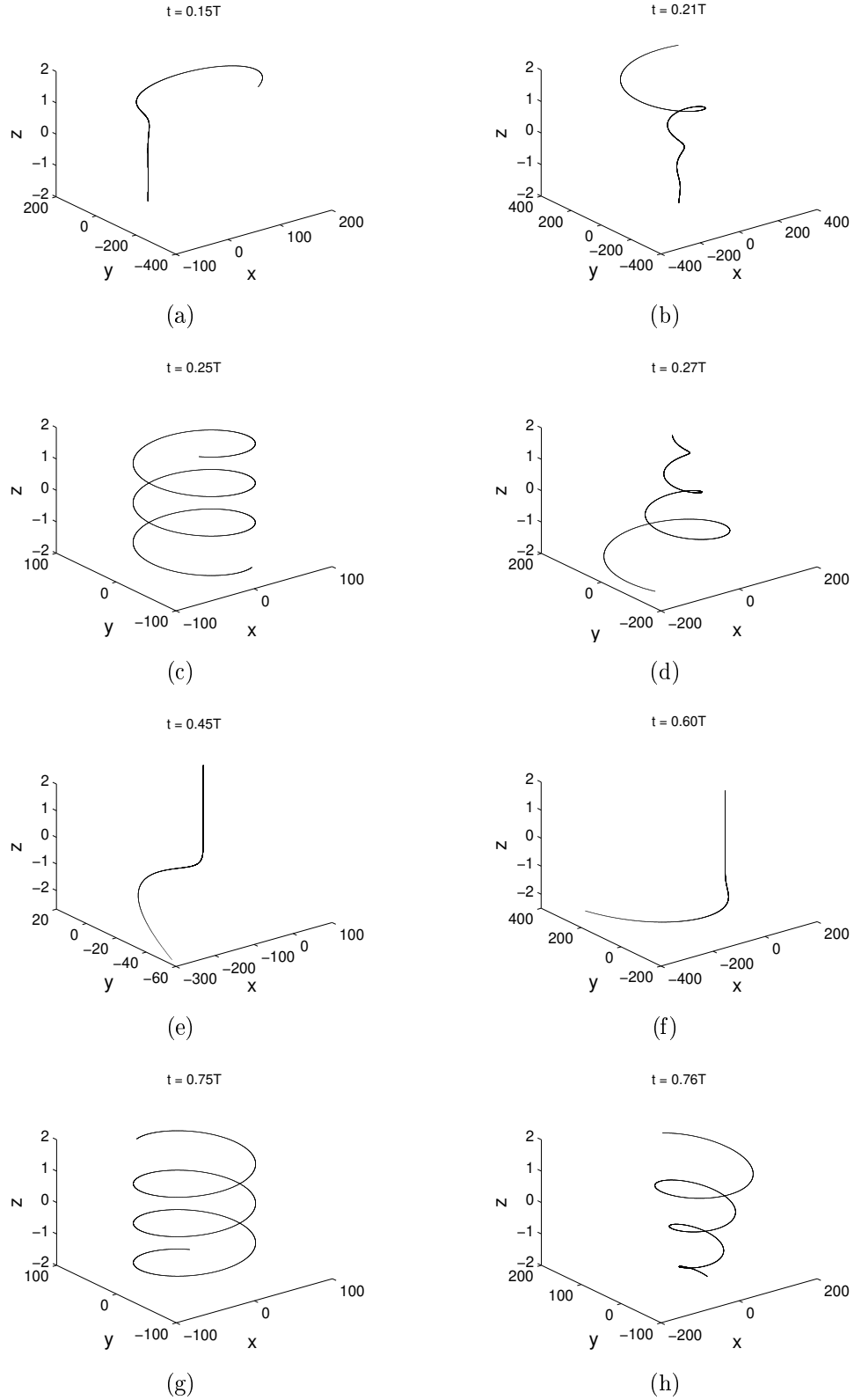


Figura 5.7: Gráfico dos zeros da função de onda $\Psi(\mathbf{r}, t)$ em (5.38), para $A = 5$, $\omega = 1$, $\varepsilon = 0.12$ e $\varphi_0 = 0$.

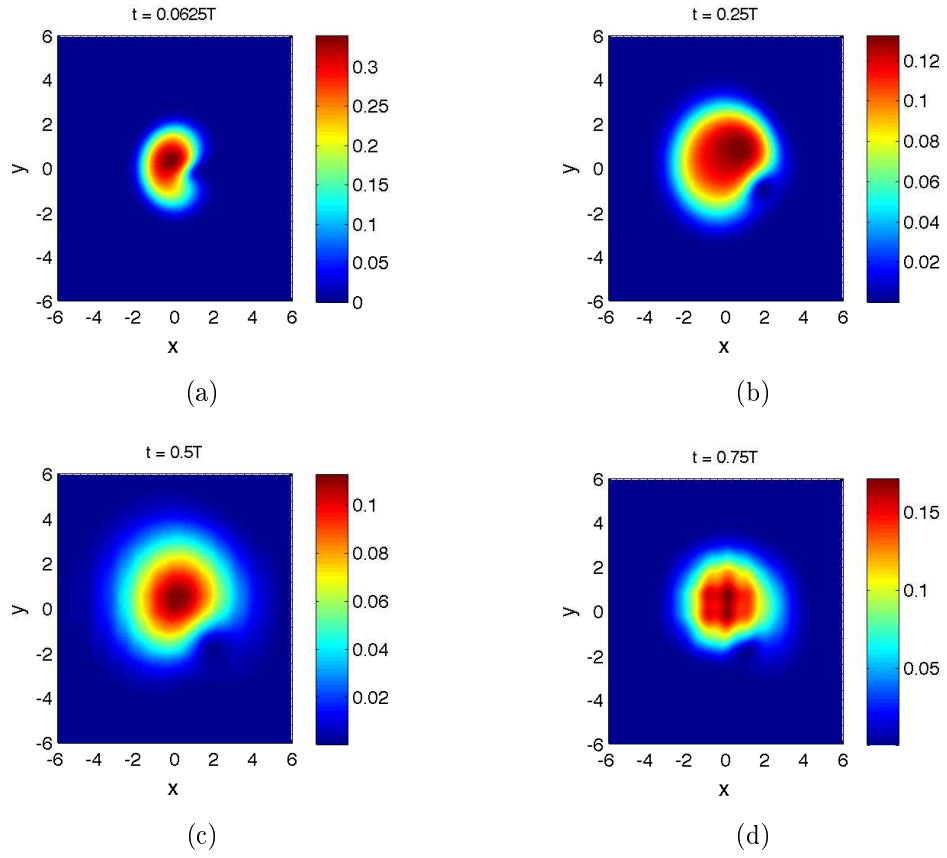


Figura 5.8: Mapa de contorno do quadrado da norma da função de onda $|\psi(\mathbf{r}, t)|^2$, solução da equação GP, para $g = 20$ e $\rho = 0.36$.

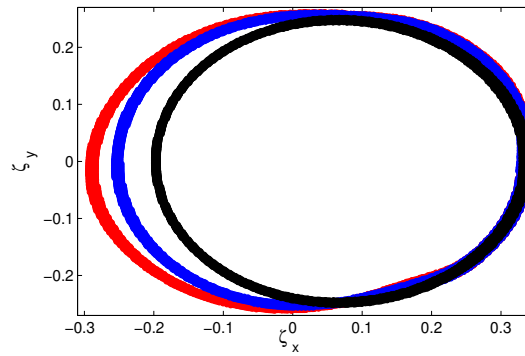


Figura 5.9: Gráfico dos zeros da função de onda para $g = 0.75$ (cor vermelha), $g = 0.50$ (cor azul), e $g = 0$ (cor preto), com $\rho = 0.26$.

Capítulo 6

CONCLUSÕES

Neste trabalho estudamos a possibilidade de condensação de Bose-Einstein e as propriedades termodinâmicas de um gás de bósons, em um potencial finito fracamente confinante. Usando uma teoria semi-clássica, incorporámos o efeito do potencial e das interações entre as partículas em uma densidade de estados obtida a partir do espectro de partícula livre, com um termo de massa efetiva, separado por um “gap” de energia de um único estado ligado. As consequências foram um incremento da temperatura da transição, comparada com o caso do gás uniforme, a medida que o sistema fazia-se mais confinado ou quando apresentava uma diminuição da massa efetiva. Além, devido a que conservamos a idéia do limite termodinâmico, um dos resultados interessantes é a descontinuidade finita na capacidade calórica e a associação de um calor latente, o que mantém o fenômeno como uma transição de fase de primeira ordem.

Aplicamos a teoria de campo médio de Bogoliubov a um sistema de partículas interagentes. Utilizamos os algoritmos Runge-Kutta e o método Shooting para resolver numericamente a equação de Gross-Pitaevskii com o mesmo potencial quadrado finito e de simetria esférica. Determinamos o perfil da função de onda do condensado e de suas excitações coerentes não-lineares a temperatura zero, as quais são caracterizadas por uma distribuição espacial diferente para cada modo coerente e pelo aparecimento de nós na função de onda. No caso de interações atrativas, encontramos que existe um

número máximo de átomos que podemos condensar, e que este máximo diminui com o aumento da profundidade do poço de potencial. Também encontramos que existe a possibilidade de penetração da função de onda na barreira de potencial, analisando os efeitos para diferentes valores do comprimento de espalhamento a .

Um mecanismo para gerar estados vórtice e anti-vórtice em um condensado de Bose-Einstein, no limite de um gás fracamente interagente, foi proposto. Nós estudamos um sistema confinado em duas dimensões por um potencial harmônico, sendo fracamente confinado na terceira dimensão. Achemos uma solução exata da equação de Schrödinger linear, construída da superposição de duas soluções, uma estacionária (vórtice) e um pacote de onda deslocado espacialmente, que mantém sua forma enquanto se move ao longo de uma trajetória. Este tipo de soluções não tinham sido estudadas na literatura e o resultado mais importante é a possibilidade de formar uma cadeia infinita de vórtices com uma dinâmica não-trivial, assim como a presença de fenômenos de criação e aniquilação de um par vórtice—anti-vórtice. O método aqui é estendido para pequenas não-linearidades na equação de Schrödinger, encontrando um comportamento semelhante ao caso linear, mas com mudanças na distribuição espacial da trajetória dos zeros da função de onda.

APÊNDICE A

FUNÇÕES INTEGRAIS DE BOSE-EINSTEIN

As funções integrais de Bose-Einstein são definidas como

$$g_\nu(x) = \frac{1}{\Gamma(\nu)} \int_0^\infty \frac{t^{\nu-1} dt}{x^{-1}e^t - 1}, \quad (0 \leq x < 1, \nu > 0; x = 1, \nu > 1), \quad (\text{A.1})$$

para $x < 1$ o denominador em (A.1) pode ser expandido em uma série geométrica e integrado termo a termo, resultando

$$g_\nu(x) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{x^k}{k^\nu}. \quad (\text{A.2})$$

$g_\nu(x)$ é uma função monótona crescente de x , e na figura A.1 mostramos um gráfico para $g_{3/2}(x)$. Para $x = 1$, $\nu > 1$, a função $g_\nu(x)$ é reconhecida como a função zeta de Riemann $\zeta(\nu)$, isto é:

$$g_\nu(1) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k^\nu} = \zeta(\nu), \quad (\nu > 1). \quad (\text{A.3})$$

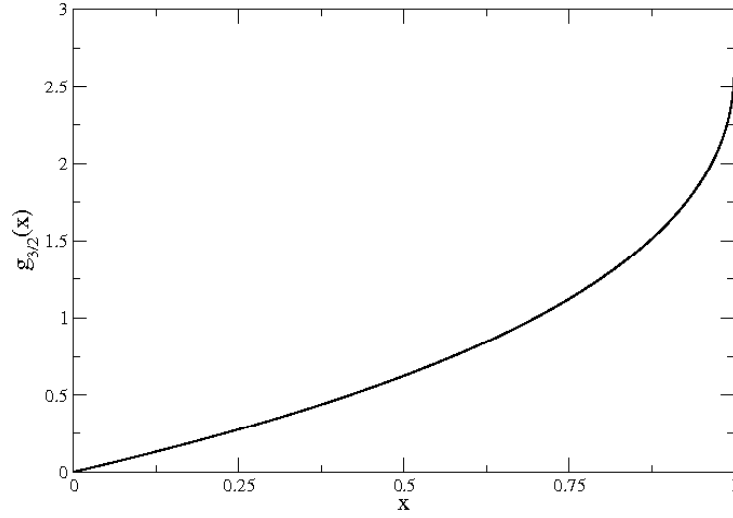


Figura A.1: Função integral $g_{3/2}(x)$

Para $\nu = 1$, da integral (A.1), encontra-se que $g_1(x) = -\ln(1 - x)$, portanto diverge quando $x \rightarrow 1$. Em geral, pode demonstrar-se que $g_\nu(1)$ diverge para $\nu \leq 1$.

Uma importante relação de recorrência para as funções $g_\nu(x)$ é

$$x \frac{\partial}{\partial x} [g_\nu(x)] = g_{\nu-1}(x). \quad (\text{A.4})$$

Referências Bibliográficas

- [1] A. Einstein, Sitzungsber. Berliner Ber. **22**, 261 (1924); *ibid.* **1**, 3 (1925).
- [2] R.K. Pathria, *Statistical Mechanics* (Pergamon, New York, 1972)
- [3] K. Huang, *Statistical Mechanics* (John Wiley & Sons, New York, 1963)
- [4] N. N. Bogoliubov, J. Phys. (Moscow) **11**, 23 (1947).
- [5] K. Huang, C. N. Yang and J. M. Luttinger, Phys. Rev. **105**, 776 (1957).
- [6] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman, and E. A. Cornell, Science **269**, 198 (1995).
- [7] K. B. Davis, M.O. Mewes, M. R. Andrews, N. J. van Druten, D. S. Durfee, D. M. Kurn, and W. Ketterle, Phys. Rev. Lett. **75**, 3969 (1995).
- [8] C. C. Bradley, C. A. Sackett, J. J. Tollett, and R. G. Hulet, Phys. Rev. Lett. **75**, 1687 (1995).
- [9] D. G. Fried, T. C. Killian, L. Willmann, D. Landhuis, S. C. Moss, D. Kleppner, and T. J. Greytak, Phys. Rev. Lett. **81**, 3811 (1998).
- [10] F. Pereira Dos Santos, J. Léonard, Junmin Wang, C. J. Barrelet, F. Perales, E. Rasel, C. S. Unnikrishnan, M. Leduc, and C. Cohen-Tannoudji, Phys. Rev. Lett. **86**, 3459 (2001).

-
- [11] S. Kraft, F. Vogt, O. Appel, F. Riehle, and U. Sterr, Phys. Rev. Lett. **103**, 130401 (2009).
- [12] S. Stellmer, M. K. Tey, B. Huang, R. Grimm, and F. Schreck, Phys. Rev. Lett. **103**, 200401 (2009).
- [13] X. Yi, H. Wang e C. Sun, Physica Scripta **57**, 324 (1998).
- [14] K. Kirsten e D. J. Toms, Phys. Rev. A **54**, 4188 (1996).
- [15] A. Gammal, T. Frederico, and L. Tomio, Phys. Rev. E **60**, 2421 (1999).
- [16] V. S. Filho, A. Gammal, and L. Tomio, Phys. Rev. A **66**, 043605 (2002).
- [17] S. M. Holz, V. S. Filho, L. Tomio, and A. Gammal, Phys. Rev. A **74**, 013406 (2006).
- [18] P. W. H. Pinkse, A. Mosk, M. Weidemüller, M. W. Reynolds, T. W. Hijmans, and J.T. Walraven, Phys. Rev. Lett. **78**, 990 (1997).
- [19] V. L. Ginzburg and L. P. Pitaevskii, Zh. Éksp. Teor. Fiz. **34**, 1240 (1958); E. P. Gross, Nuovo Cimento **20**, 454 (1961); L. P. Pitaevskii, Sov. Phys. JETP **13**, 451 (1961).
- [20] S. Burger *et al.*, Phys. Rev. Lett. **83**, 5198 (1999); J. Denschlag *et al.*, Science **287**, 97 (2000); S. Stellmer *et al.*, Phys. Rev. Lett. **101**, 120406 (2008); A. Weller, *et al.*, *ibid.* **101**, 130401 (2008).
- [21] G. B. Partridge, *et al.*, Nature **417**, 150 (2002); L. Khaykovich, *et al.*, Science **296**, 1290 (2002); S. L. Cornish, *et al.*, Phys. Rev. Lett. **96**, 170401 (2006).
- [22] B. Eiermann *et al.*, Phys. Rev. Lett. **92**, 230401(2004).
- [23] C. Becker, *et al.*, Nature Phys. **4**, 496 (2008).
- [24] M. R. Matthews, *et al.*, Phys. Rev. Lett. **83**, 2498 (1999); K. W. Madison, *et al.*, *ibid.* **84**, 86809 (1999); S. Inouye *et al.*, *ibid.* **87**, 080402 (2001); J. R. Abo-Shaeer, *et al.*, Science **292**, 476 (2001).

- [25] B. P. Anderson, *et al.*, Phys. Rev. Lett. **86**, 2926 (2001); Z. Dutton, *et al.*, Science **293**, 663 (2001); N. S. Ginsberg, *et al.*, Phys. Rev. Lett. **94**, 040403 (2005); I. Shomroni, *et al.*, Nature Physics **5**, 193 (2009).
- [26] K. M. Mertes, *et al.*, Phys. Rev. Lett. **99**, 190402 (2007).
- [27] J. J. Chang, P. Engels, and M. A. Hoefer, Phys. Rev. Lett. **101**, 170404 (2008).
- [28] P. Engels, C. Atherton, and M. A. Hoefer, Phys. Rev. Lett. **98**, 095301 (2007).
- [29] C. C. Bradley, C. A. Sackett, and R. G. Hulet, Phys. Rev. Lett. **78**, 985 (1997); J. M. Gerton, *et al.*, Nature **408**, 692 (2000); J. L. Roberts, *et al.*, Phys. Rev. Lett. **86**, 4211 (2001); E. A. Donley, *et al.*, Nature **412**, 295 (2001).
- [30] R. Masut, and W. J. Mullin, Am. J. Phys. **47**, 493 (1979); L. D. Carr, C. W. Clark and W. P. Reinhardt, Phys. Rev. A **62**, 063610 (2000); L. D. Carr, K. W. Madmud, and W. P. Reinhardt, Phys. Rev. A **64**, 033603 (2001).
- [31] S. K. Adhikari, Eur. Phys. J. D **42**, 279 (2007).
- [32] L. D. Carr, M. J. Holland and B. A. Malomed, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **38**, 3217 (2005).
- [33] S. E. Pollack, *et al.*, Phys. Rev. Lett. **102**, 090402 (2009).
- [34] J. J. García-Ripoll, V. M. Pérez-García and V. Vekslerchik, Phys. Rev. E **64**, 056602 (2001).
- [35] J. C. Butcher, *Numerical methods for ordinary differential equations* (John Wiley & Sons, 2003).
- [36] W. H. Press, B. P. Flannery, S. A. Teukolsky, and W. T. Vetterling, *Numerical recipes in C: the art of scientific computing* (Cambridge University Press, 2nd edition, 1992.)
- [37] K. Kirstein and D. J. Toms, Phys. Rev. A **54**, 4188 (1996).

- [38] H. R. Pajkowski and R. K. Pathria. J. Phys. A **10**, 561 (1977).
- [39] W. Ketterle, and N. J. van Druten, Phys. Rev. A **54**, 656 (1996).
- [40] N. Akhmediev, and J. M. Soto- Crespo, Phys. Rev. A **47**, 1358 (1993); P.M. Lushnikov, and M. Saffman, Phys. Rev. E **62**, 5793 (2000); D. Mihalache, *et al.*, Phys. Rev. E **67**, 056608 (2003); P.G. Kevrekidis, *et al.*, Phys. Rev. Lett. **93**, 080403 (2004).
- [41] F. Dalfovo, S. Giorgini, L. Pitaevskii and S. Stringari, Rev. Mod. Phys. **71**, 463 (1999); L. Pitaevskii and S. Stringari, Bose-Einstein Condensation, Oxford University Press, Oxford (2003).
- [42] V. M. Pérez-García, N. G. Berloff, P. G. Kevrekidis, V. V. Konotop, and B. A. Malomed, Physica D **238**, 1289 (2009).
- [43] R. J. Donnelly, *Quantized Vortices in Helium II* (Cambridge University Press, Cambridge, England, 1991).
- [44] L. Schiff, *Quantum Mechanics* (McGraw-Hill Book Company, New York, Unites States, 1968)
- [45] Yu. S. Kivshar, T. J. Alexander, and S. K. Turitsyn, Phys. Lett. A **278**, 225 (2001).
- [46] V. I. Yukalov, E. P. Yukalova and V. S. Bagnato, Phys. Rev. A **66**, 043602 (2002).
- [47] V. I. Yukalov, E. P. Yukalova and V. S. Bagnato, Phys. Rev. A **56**, 4845 (1997).
- [48] M. Edwards, and K. Burnett, Phys. Rev. A **51**, 1382 (1995).
- [49] P. A. Ruprecht, M. J. Holland, K. Burnett, and M. Edwards, Phys. Rev. A **51**, 4704 (1995).
- [50] J. J. García-Ripoll, and V. M. Pérez-García, Phys. Rev. A, **60**, 4864 (1999).